

Δομή και Δραστηκότητα στην Οργανική Χημεία

Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Πατρών

**Ακαδημαϊκό Έτος
2023-2024**

Εξάμηνο 1 – Χειμερινό

Διδάσκοντες

Γεράσιμος Ρασσιάς, Αναπλ. Καθηγητής
Carmen Simal Fernández, Επι. Καθηγήτρια

Οργάνωση Μαθήματος [CHE_XO102]

Παραδόσεις:

Δευτέρα 11:00-13:00

Πέμπτη 11:00-13:00

ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΑ

<https://eclass.upatras.gr/>

Γ. Ρασσιάς

Email: rassiasg@upatras.gr

Tel.: (+30) 2610 997912

Νέο Κτήριο (3^{ος} όροφος)

Τμήμα Χημείας

C. Simal Fernández

Email: csimal@upatras.gr

Tel.: (+30) 2610 996023

Νότιο Κτήριο (2^{ος} όροφος)

Τμήμα Χημείας

Ύλη Μαθήματος – Syllabus 2023-2024 [CHE_XO102]

ΔΟΜΗ	Κ1. Ηλεκτρόνια, Δεσμοί και Μοριακές αναπαραστάσεις Κ2. Αλκάνια και Κυκλοαλκάνια Κ3. Διαμορφωτική Ανάλυση Κ4. Στερεοϊσομέρεια	ΟΚΤΩΒΡΙΟΣ	Μέρος Α
ΔΡΑΣΤΙΚΟΤΗΤΑ	Οξέα / Βάσεις Πυρηνόφιλα / Ηλεκτρονιόφιλα SN2 / E2	ΝΟΕΜΒΡΙΟΣ	Μέρος Β

Προτεινόμενη Βιβλιογραφία

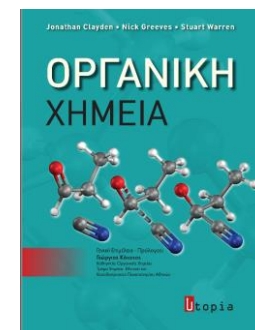
1. “**Οργανική Χημεία**”, Carey Francis A., Giuliano Robert M., Allison Neil T., Bane Susan L. Απόδοση στα Ελληνικά: Α. Τρογκάνης, Γ. Ρασσιάς, Α. Τσοτίνης Ανδρέας, Εκδόσεις ΚΡΙΤΙΚΗ, 2020.



2. “**Οργανική Χημεία**”, J. McMurry, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2017.



3. “**Οργανική Χημεία**”, Clayden J., Greeves, N., Warren, S. Τόμος Ι, Απόδοση στα Ελληνικά: Γ. Κοκότος κ.ά., Εκδόσεις Utopia, 2016.



Δομή και Δραστικότητα στην Οργανική Χημεία

Μέρος Α΄

Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Πατρών

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

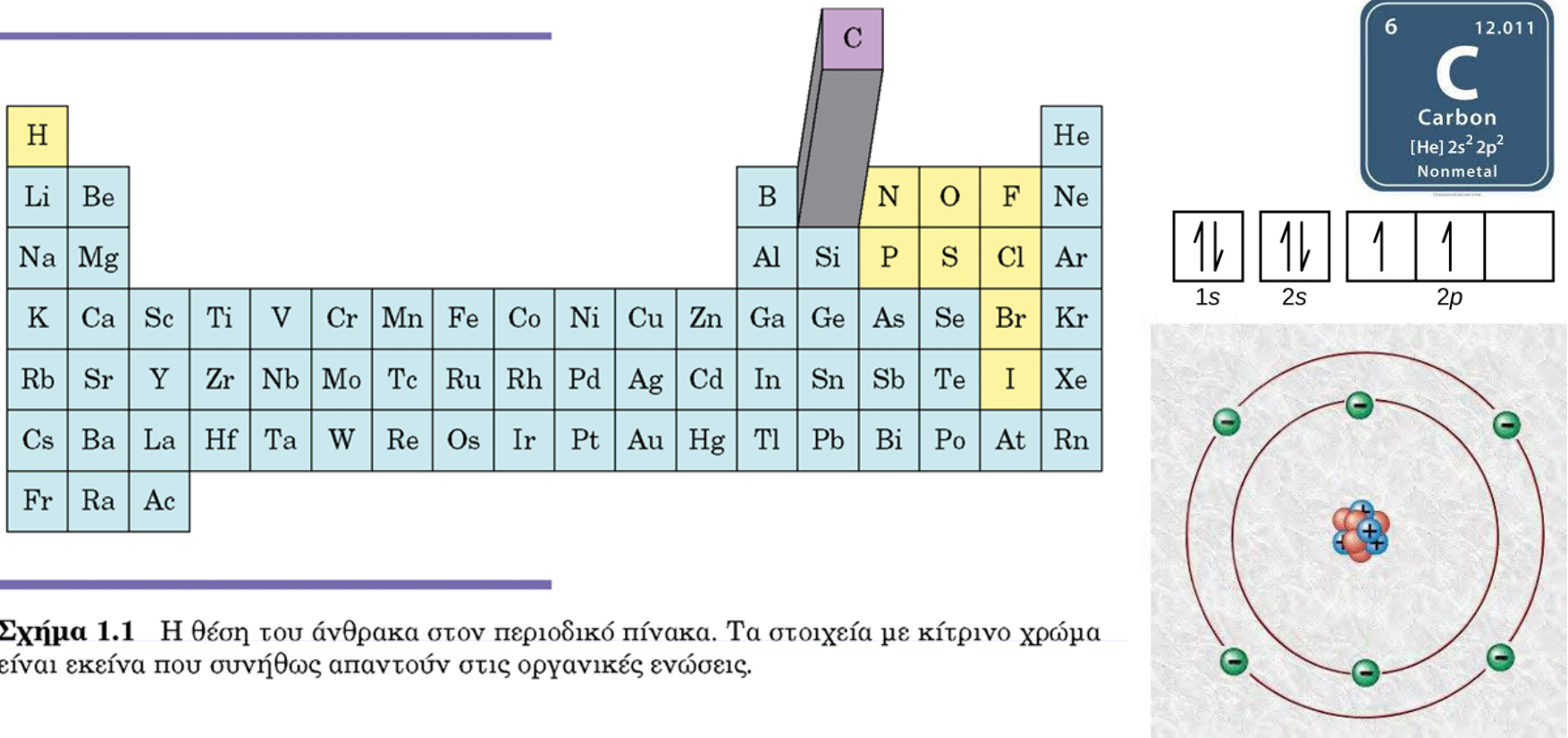
Ηλεκτρόνια, Δεσμοί και Μοριακές αναπαραστάσεις

Ηλεκτρόνια, Δεσμοί και Μοριακές αναπαράστασεις

- ◆ Εισαγωγή στην Οργανική Χημεία
- ◆ Ατομική τροχιακά (orbitals)
 - Ηλεκτρονικές διαμορφώσεις
 - Το άτομο του άνθρακα
- ◆ Χημικός Δομές (Κατά Lewis)
- ◆ Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές
- ◆ Ηλεκτραρνητικότητα
- ◆ Διπολική ροπή (Επαγωγικό Φαινόμενο)
- ◆ Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού
- ◆ Μοριακά Τροχιακά. Υβριδισμός

Τι είναι η Οργανική Χημεία;

- Η Οργανική Χημεία είναι η χημεία των ενώσεων του άνθρακα (C).



- ✓ Κάθε άτομο άνθρακα (C) σχηματίζει 4 δεσμούς με άλλα άτομα.
- ✓ Ένα άτομο του άνθρακα (C) έχει τη δυνατότητα να κάνει ισχυρούς δεσμούς με άλλα άτομα άνθρακα.
- ✓ Σχηματίζει επίσης ισχυρούς δεσμούς με άλλα άτομα, όπως, H, N, O, P, F, Cl, S.

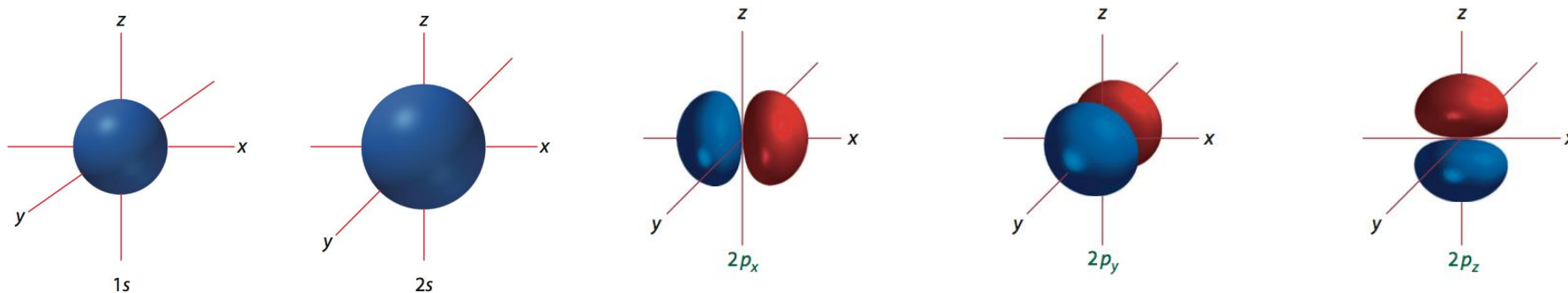
Ατομικά τροχιακά (orbitals)

Το **ατομικό τροχιακό** είναι έννοια η οποία προσδιορίζει μια περιοχή του τρισδιάστατου χώρου στην οποία υπάρχει πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο ενός ατόμου. **Κάθε ηλεκτρόνιο ενός ατόμου βρίσκεται σε ένα ορισμένο τροχιακό.**

Τέσσερα διαφορετικά είδη τροχιακών **s**, **p**, **d**, και **f**

s και p τροχιακά είναι τα πιο βασικά στην οργανική χημεία

- *s* τροχιακά: σφαιρικά, πυρήνας στο κέντρο
- *p* τροχιακά: σχήμα αλτήρα, πυρήνας στο κέντρο



Μορφή τροχιακών

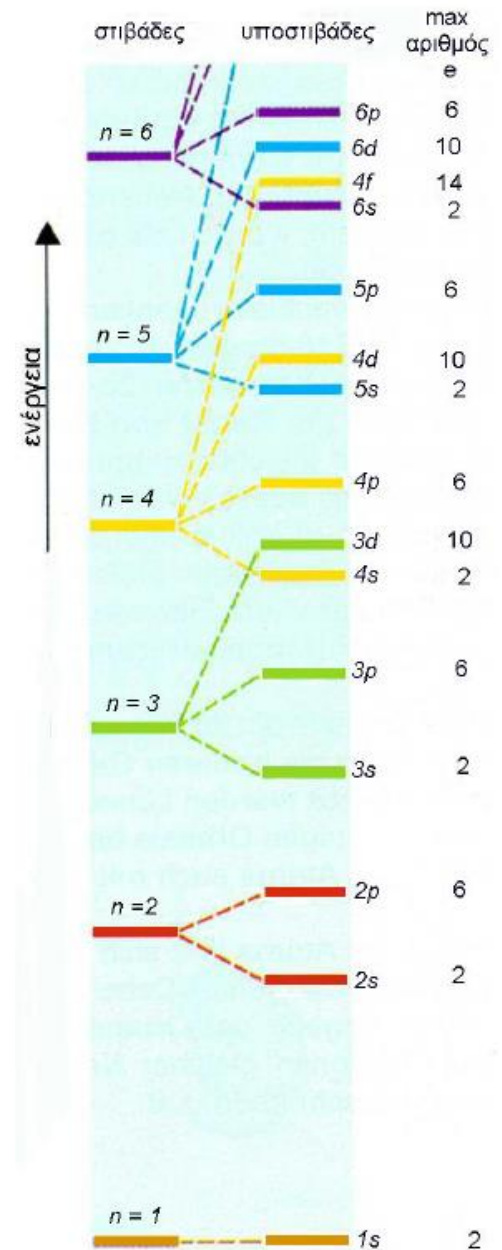
Ατομικά τροχιακά (orbitals)

Ηλεκτρονικές διαμορφώσεις

Κβαντομηχανικής θεώρησης: Για κάθε ενεργειακή στιβάδα του μοντέλου του Bohr **υπάρχουν και ενδιάμεσες ενεργειακές καταστάσεις (υποστιβάδες)**, και μάλιστα με διαφορετικό σχήμα και προσανατολισμό στο χώρο.

- ❑ Τα τροχιακά είναι κατανεμημένα σε στιβάδες (shells) αυξανόμενου μεγέθους και ενέργειας.
- ❑ Διαφορετικές στιβάδες περιέχουν διαφορετικό αριθμό και είδος τροχιακών.
- ❑ Κάθε τροχιακό μπορεί να χωρέσει έως και δύο ηλεκτρόνια.

- Η πρώτη στιβάδα περιέχει ένα τροχιακό **s** (1s), (2 e⁻)
- Η δεύτερη στιβάδα περιέχει ένα **s** τροχιακό (2s) και τρία **p** τροχιακά (2p), (8 e⁻)
- Η τρίτη στιβάδα περιέχει ένα **s** τροχιακό (3s), τρία **p** τροχιακά (3p), και πέντε **d** τροχιακά (3d), (18 e⁻)



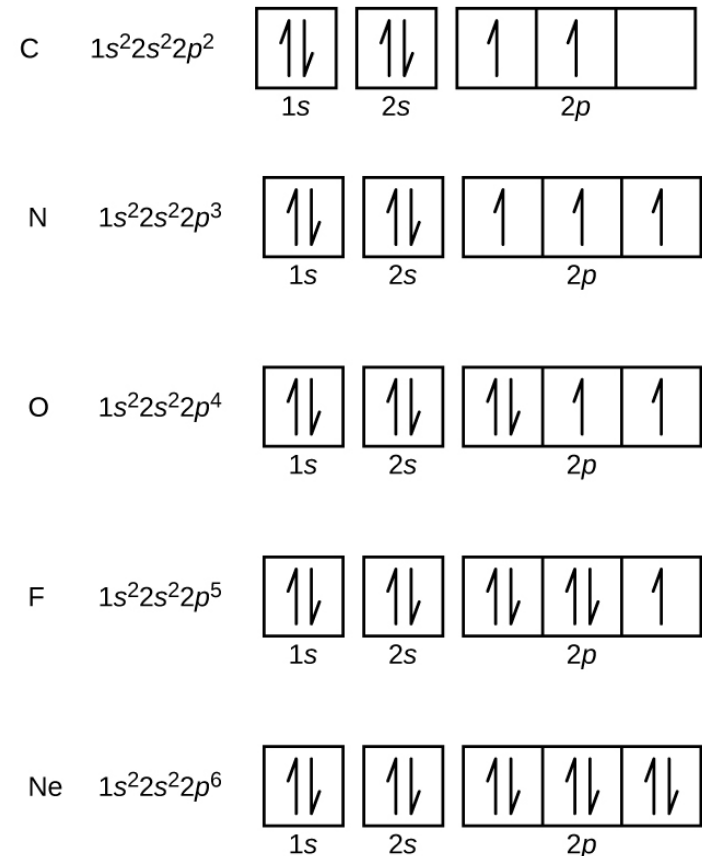
Ατομικά τροχιακά (orbitals)

Ηλεκτρονικές διαμορφώσεις

	K	L	M	N
${}^1\text{H}$	$1s^1$			
${}^2\text{He}$	$1s^2$			
${}^3\text{Li}$	$1s^2$	$2s^1$		
${}^4\text{Be}$	$1s^2$	$2s^2$		
${}^5\text{B}$	$1s^2$	$2s^2 2p^1$		
${}^6\text{C}$	$1s^2$	$2s^2 2p^2$		
${}^7\text{N}$	$1s^2$	$2s^2 2p^3$		
${}^8\text{O}$	$1s^2$	$2s^2 2p^4$		
${}^9\text{F}$	$1s^2$	$2s^2 2p^5$		
${}^{10}\text{Ne}$	$1s^2$	$2s^2 2p^6$		

Ηλεκτρόνια σθένους

Ηλεκτρόνια σθένους



Ατομικά τροχιακά (orbitals)

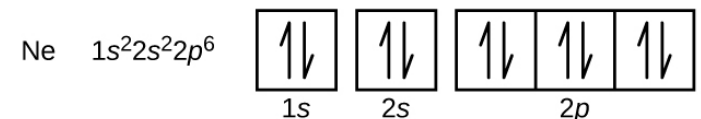
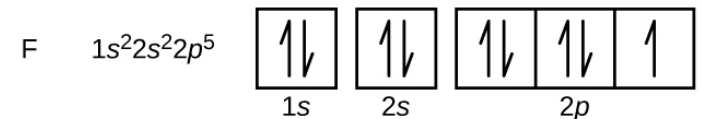
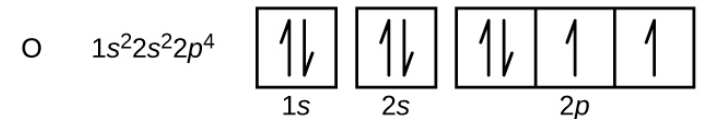
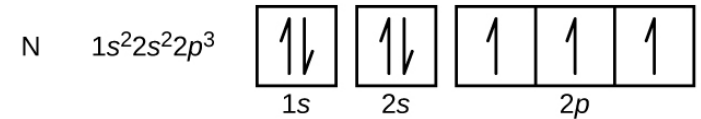
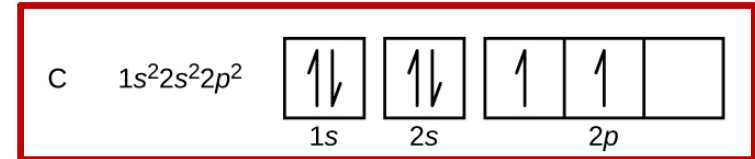
Το άτομο του άνθρακα

Ο άνθρακας είναι τετρασθενής και μπορεί να σχηματίσει έως και τέσσερις δεσμούς όταν συνδέεται με τον ίδιο ή άλλα στοιχεία.

	K	L	M	N
^1H	$1s^1$			
^2He	$1s^2$			
^3Li	$1s^2$	$2s^1$		
^4Be	$1s^2$	$2s^2$		
^5B	$1s^2$	$2s^2 2p^1$		
^6C	$1s^2$	$2s^2 2p^2$		
^7N	$1s^2$	$2s^2 2p^3$		
^8O	$1s^2$	$2s^2 2p^4$		
^9F	$1s^2$	$2s^2 2p^5$		
^{10}Ne	$1s^2$	$2s^2 2p^6$		

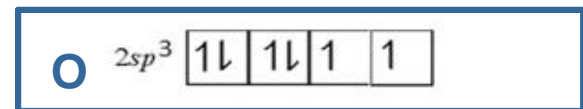
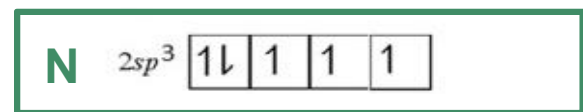
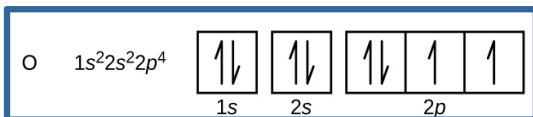
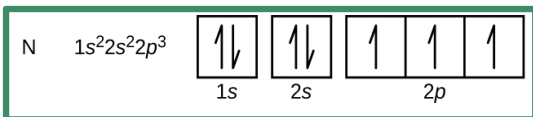
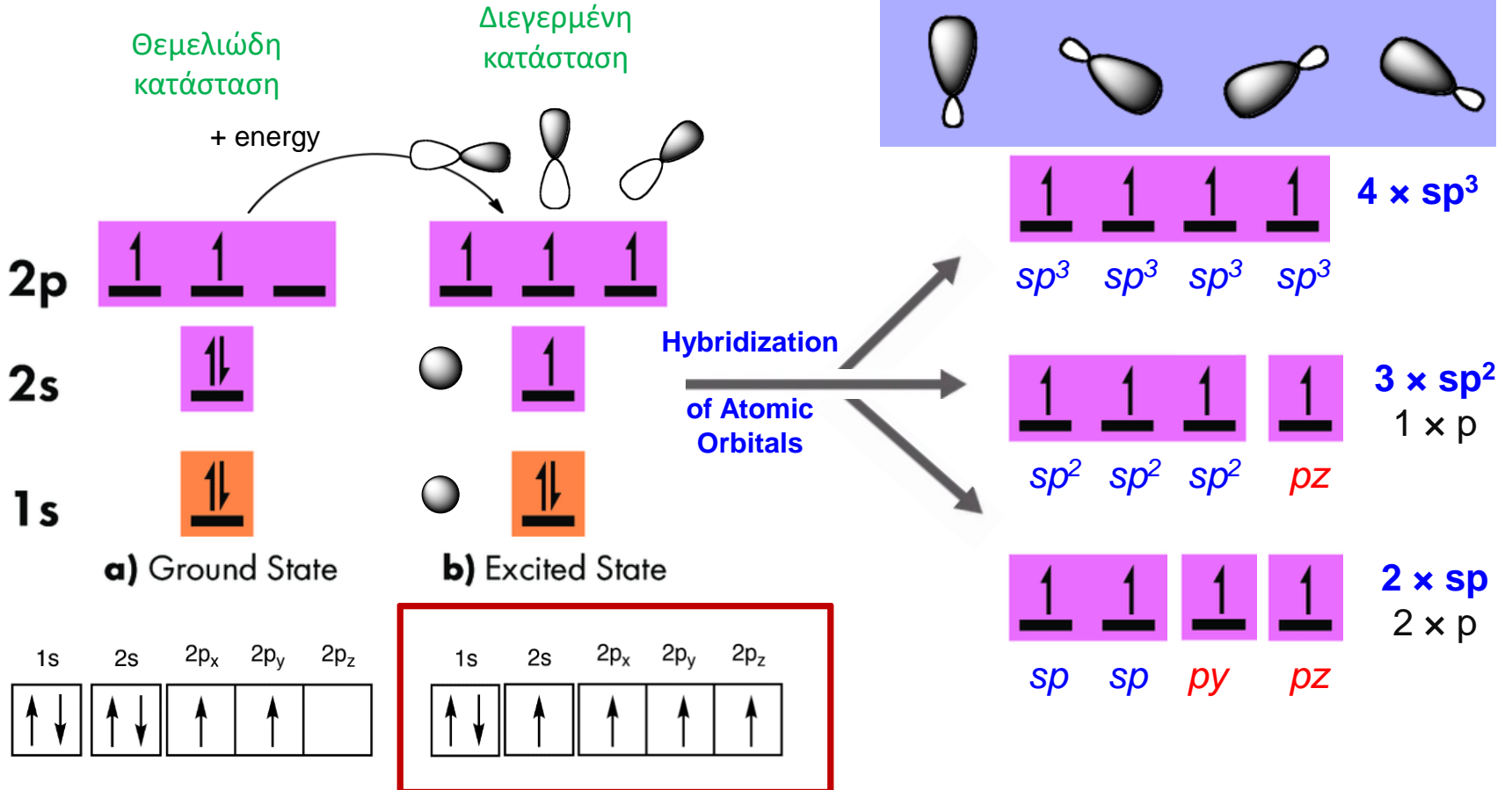
Ηλεκτρόνια σθένους

Ηλεκτρόνια σθένους



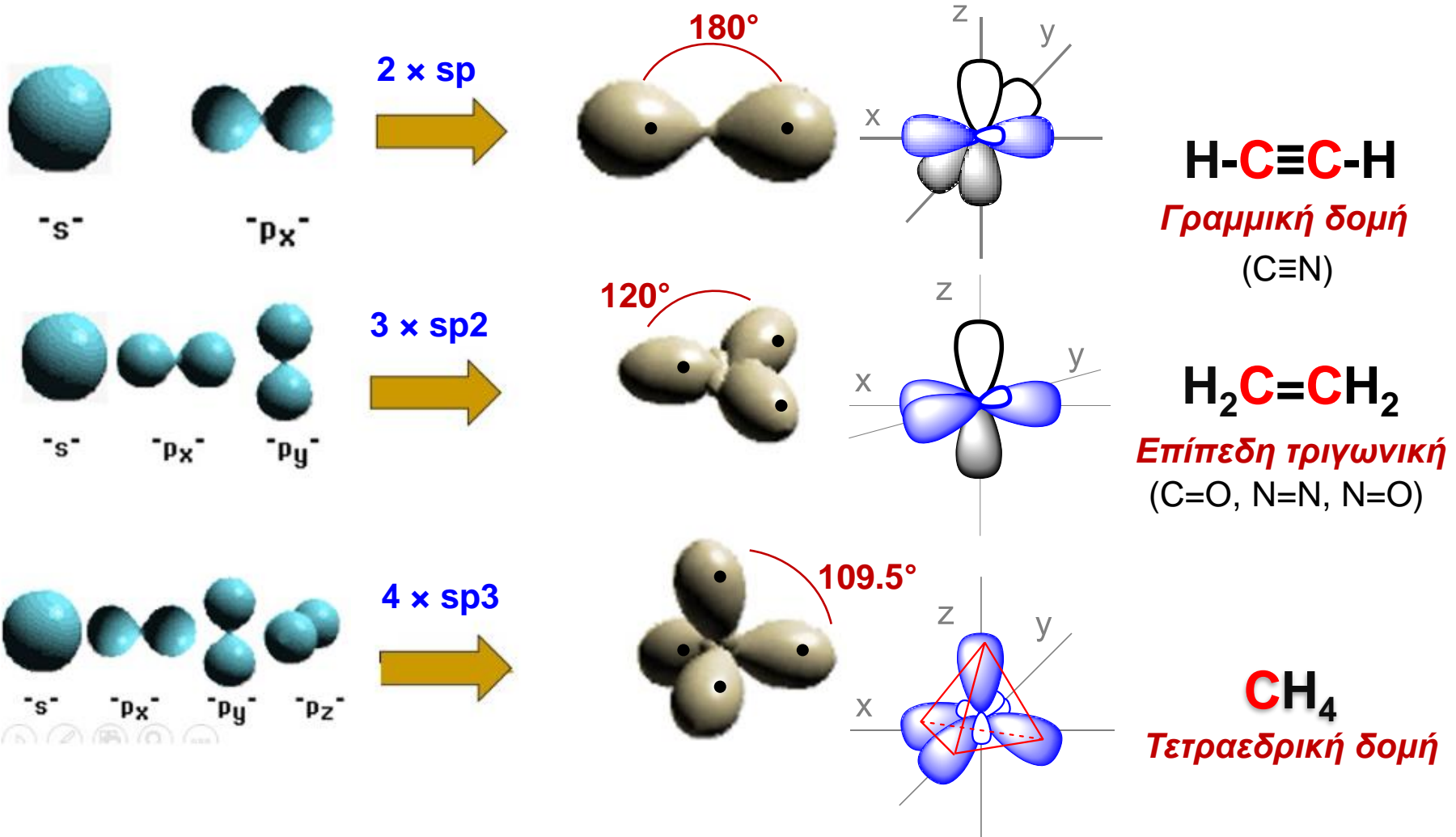
Ατομικά τροχιακά (orbitals)

Το άτομο του άνθρακα (υβριδισμός)



Ατομικά τροχιακά (orbitals)

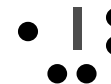
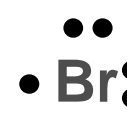
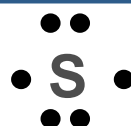
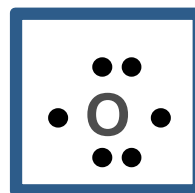
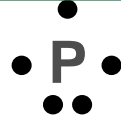
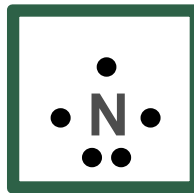
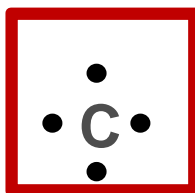
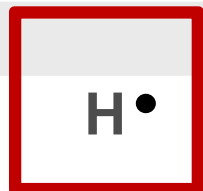
Το άτομο του άνθρακα (υβριδισμός)



Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

ΔΟΜΕΣ Lewis. Ο Lewis παρουσίασε τη θεωρία του το 1916 όπου περιγράφει τον σχηματισμό του ομοιοπολικού δεσμού, "*The Atom and the Molecule*".

1	2	3	4	5	6	7	8
^1H							^2He
^3Li	^4Be	^5B	^6C	^7N	^8O	^9F	^{10}Ne
^{11}Na	^{12}Mg	^{13}Al	^{14}Si	^{15}P	^{16}S	^{17}Cl	^{18}Ar
^{19}K	^{20}Ca					^{35}Br	
						^{53}I	



Ηλεκτρόνια σθένους

Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

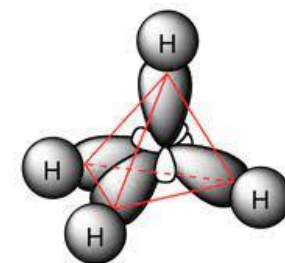
ΔΟΜΕΣ Lewis. Ο Lewis παρουσίασε τη θεωρία του το 1916 όπου περιγράφει τον σχηματισμό του ομοιοπολικού δεσμού, “*The Atom and the Molecule*”.

- Στους δεσμούς συμμετέχουν μόνο τα ηλεκτρόνια σθένους.
- Τα ηλεκτρόνια σθένους στη συνέχεια διαμοιράζονται μεταξύ των συνδεδεμένων ατόμων **με βάση τον κανόνα της οκτάδας** (δομή ευγενούς αερίου).

Τελείες αναπαριστούν ηλεκτρόνια σθένους. Η παύλα, χρησιμοποιείται για να αναπαραστήσει ένα ζεύγος e^- .

Πλήθος ηλεκτρονίων σθένους στο άτομο	Άτομα και επαρκής αριθμός ηλεκτρονίων για τη συμπλήρωση οκτάδας	Δομή Lewis	
		Με τελείες	Με γραμμές
4	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \cdot \\ \text{H} \cdot \cdot \text{C} \cdot \cdot \text{H} \\ \cdot \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \text{H} : \text{C} : \text{H} \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
5	$\begin{array}{c} \text{H} \cdot \cdot \cdot \text{N} \cdot \cdot \cdot \text{H} \\ \cdot \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \text{H} : \text{N} : \text{H} \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} - \text{N} - \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
6	$\text{H} \cdot \cdot \cdot \text{O} \cdot \cdot \cdot \text{H}$	$\text{H} : \text{O} : \text{H}$	$\text{H} - \text{O} - \text{H}$
7	$\text{H} \cdot \cdot \cdot \text{F} \cdot$	$\text{H} : \text{F} \cdot$	$\text{H} - \text{F} \cdot$

Πραγματικότητα !!



(sp³)

Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

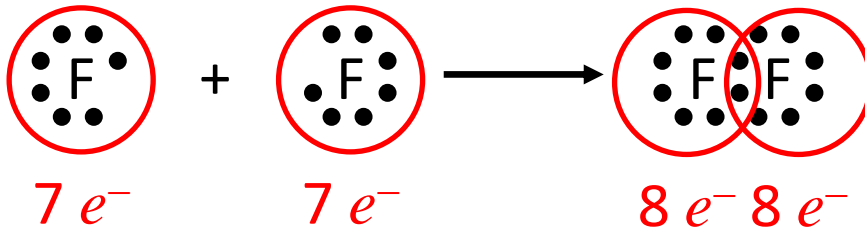
ΚΑΝΟΝΑΣ ΟΚΤΑΔΑΣ ($8e^-$)

Τα άτομα αποβάλλουν ή προσλαμβάνουν ηλεκτρόνια (ιοντικός δεσμός) ή αμοιβαία συνεισφέρουν ηλεκτρόνια (ομοιοπολικός δεσμός), προκειμένου να αποκτήσουν δομή ευγενούς αερίου, δηλαδή, **οκτώ ηλεκτρόνια** στην τελευταία τους στιβάδα. *Εξαιρείται η στιβάδα $n=1$, που συμπληρώνεται με δύο ηλεκτρόνια.*

Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Παραδείγματα σχηματισμού δεσμών και εφαρμογής του κανόνα των $8e^-$

Απλών ομοιοπολικών δεσμών

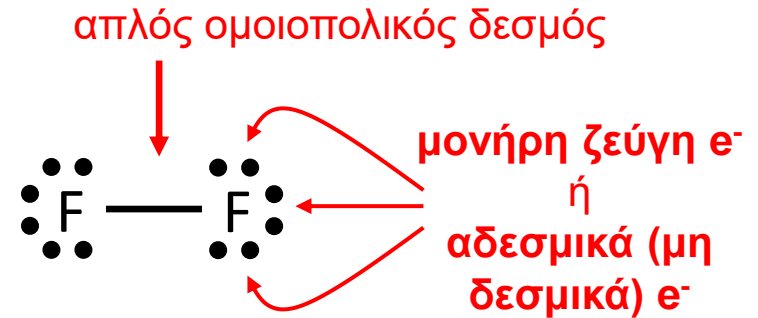


[He] $2s^2 2p^5$

[He] $2s^2 2p^5$

[Ne]

[Ne]



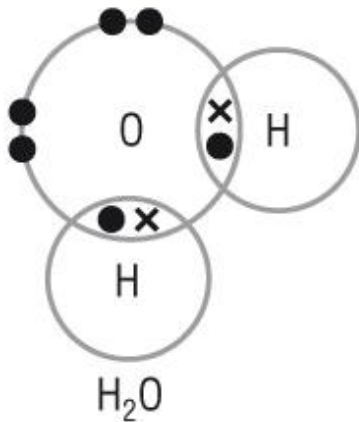
Παράδειγμα ανάλυσης για το F_2

Το **φθόριο έχει 7 δικά του ηλεκτρόνια (ηλεκτρόνια σθένους)** και **8 συνολικά στο μόριο του F_2**

Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Παραδείγματα σχηματισμού δεσμών και εφαρμογής του κανόνα των $8e^-$

Απλών ομοιοπολικών δεσμών



Παράδειγμα ανάλυσης για το H_2O

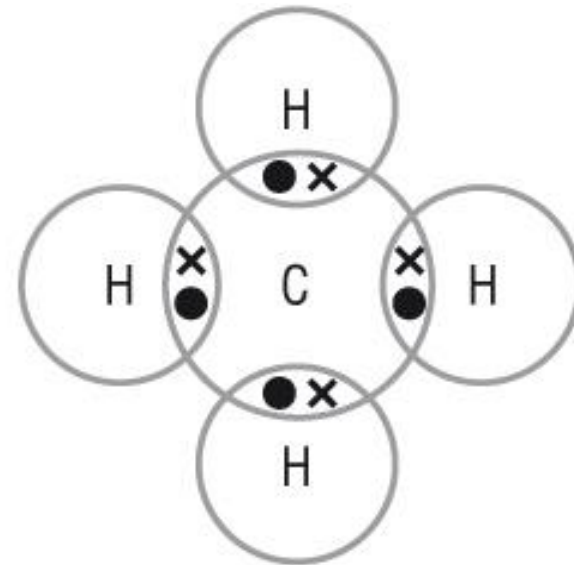
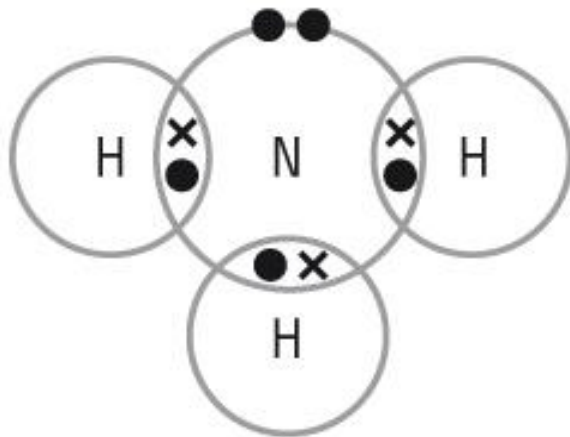
Το οξυγόνο έχει 6 δικά του ηλεκτρόνια (ηλεκτρόνια σθένους) και 8 συνολικά στο μόριο του H_2O

Το κάθε υδρογόνο έχει 1 δικό του ηλεκτρόνιο (ηλεκτρόνια σθένους) και 2 ηλεκτρόνια στο μόριο του H_2O

Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Παραδείγματα σχηματισμού δεσμών και εφαρμογής του κανόνα των $8e^-$

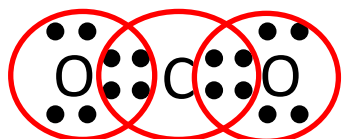
Απλών ομοιοπολικών δεσμών



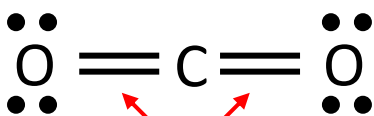
Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Παραδείγματα σχηματισμού δεσμών και εφαρμογής του κανόνα των $8e^-$

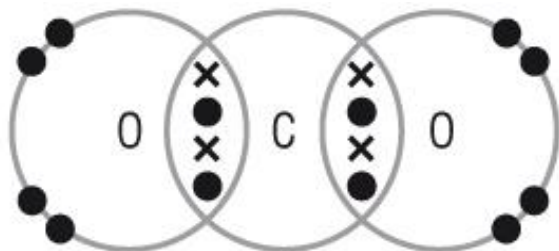
Πολλαπλών ομοιοπολικών δεσμών (C, N, O, S, P)



$8e^-$ $8e^-$ $8e^-$



διπλός ομοιοπολικός δεσμός



Παράδειγμα ανάλυσης για το CO₂

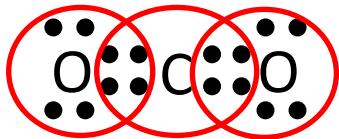
Ο άνθρακας έχει 4 δικά του ηλεκτρόνια (ηλεκτρόνια σθένους) και 8 συνολικά στο μόριο του CO₂

Το κάθε οξυγόνο έχει 6 δικά του ηλεκτρόνια (ηλεκτρόνια σθένους) και 8 ηλεκτρόνια στο μόριο του CO₂

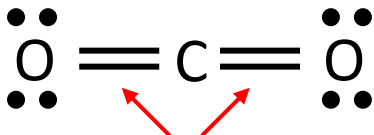
Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Παραδείγματα σχηματισμού δεσμών και εφαρμογής του κανόνα των $8e^-$

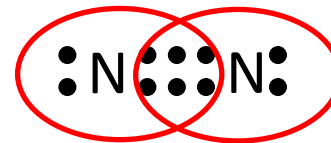
Πολλαπλών ομοιοπολικών δεσμών (C, N, O, S, P)



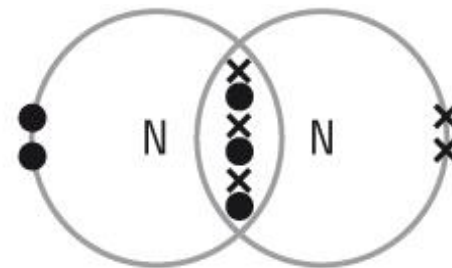
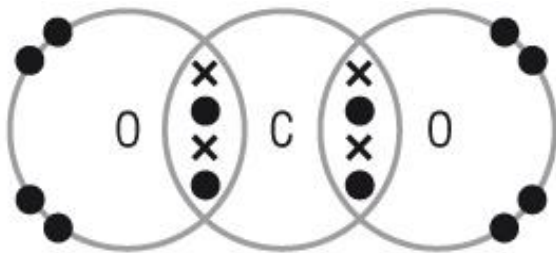
$8e^-$ $8e^-$ $8e^-$



διπλός ομοιοπολικός δεσμός



τριπλός ομοιοπολικός δεσμός



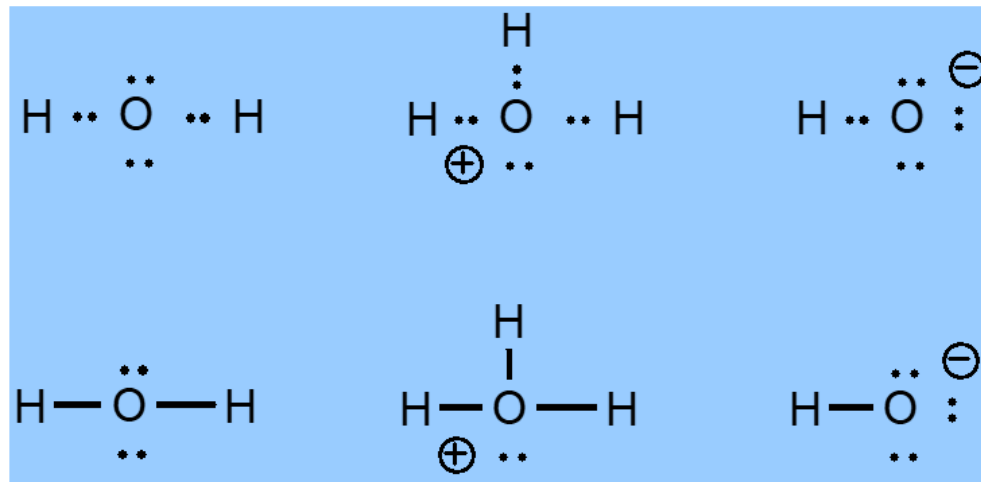
Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Σημεία που πρέπει να προσέχουμε

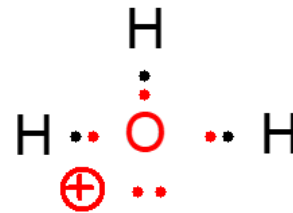
Να επαληθεύουμε και να σημειώνουμε σωστά τα **ηλεκτρόνια** και τα **φορτία**.

- Το **τυπικό φορτίο** ενός ατόμου σε ένα μόριο είναι το φορτίο που θα είχε το άτομο εάν όλα τα δεσμικά ηλεκτρόνια μοιράζονταν εξίσου.

Παράδειγμα 1:



$$\text{T.Φ. (O)} = 6 - 4 - \frac{1}{2} \cdot 4 = 0$$



$$\text{T.Φ. (O)} = 6 - 2 - \frac{1}{2} \cdot 6 = +1$$



$$\text{T.Φ. (O)} = 6 - 6 - \frac{1}{2} \cdot 2 = -1$$

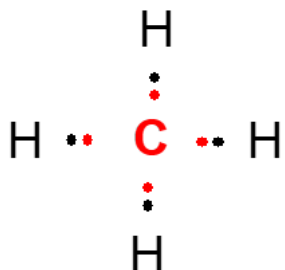
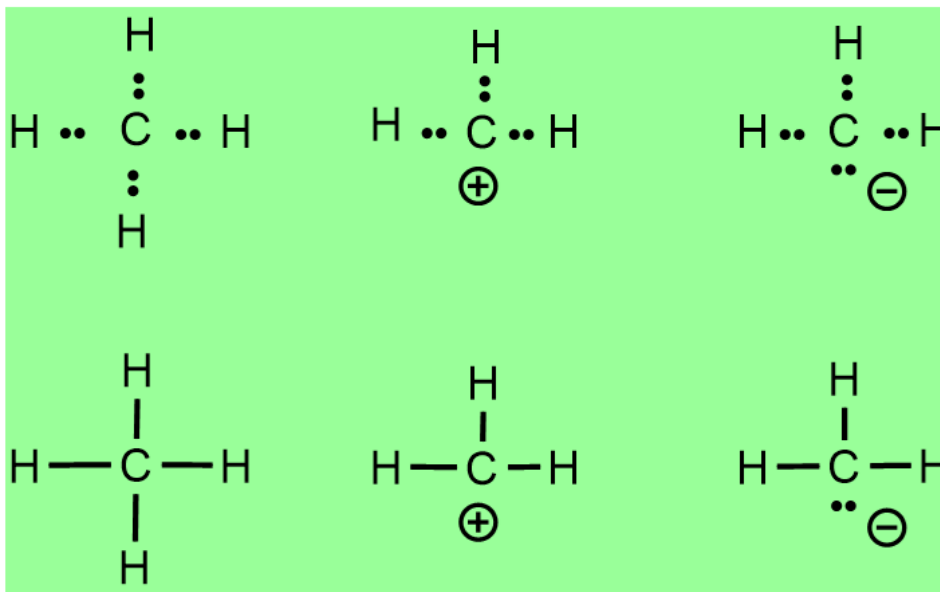
$$\text{Τυπικό φορτίο} = [n^{\circ} e^{-} \text{ σθένους}] - [n^{\circ} e^{-} \text{ αδεσμικά}] - [\frac{1}{2} n^{\circ} e^{-} \text{ δεσμικά}]$$

Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

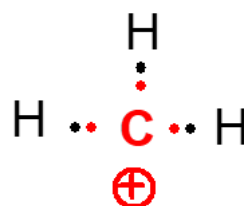
Σημεία που πρέπει να προσέχουμε

Να επαληθεύουμε και να σημειώνουμε σωστά τα **ηλεκτρόνια** και τα **φορτία**.

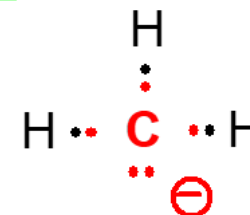
Παράδειγμα 2:



$$\text{T.Φ. (C)} = 4 - 0 - \frac{1}{2} 8 = 0$$



$$\text{T.Φ. (C)} = 4 - 0 - \frac{1}{2} 6 = +1$$



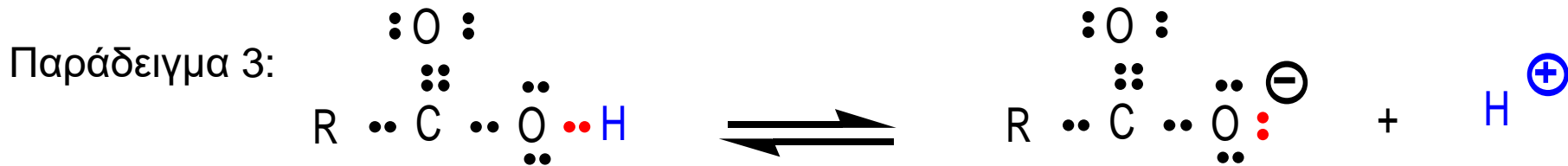
$$\text{T.Φ. (C)} = 4 - 2 - \frac{1}{2} 6 = -1$$

$$\text{Τυπικό φορτίο} = [n^{\circ} e^{-} \text{ σθένους}] - [n^{\circ} e^{-} \text{ αδεσμικά}] - [\frac{1}{2} n^{\circ} e^{-} \text{ δεσμικά}]$$

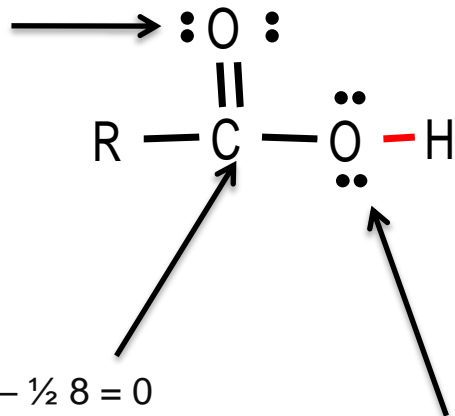
Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Σημεία που πρέπει να προσέχουμε

Να επαληθεύουμε και να σημειώνουμε σωστά τα **ηλεκτρόνια** και τα **φορτία**.

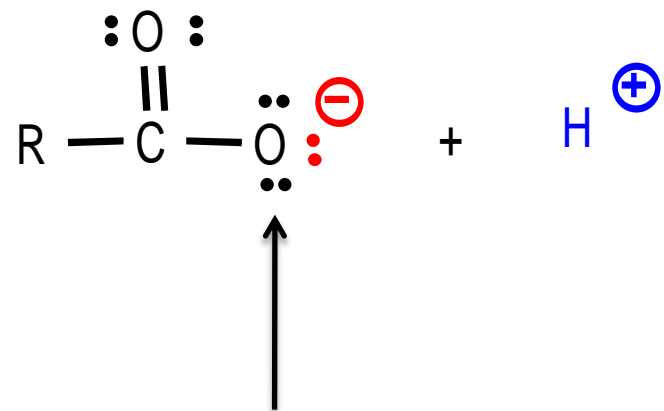


$$\text{T.Φ. (O)} = 6 - 4 - \frac{1}{2} 4 = 0$$



$$\text{T.Φ. (C)} = 4 - 0 - \frac{1}{2} 8 = 0$$

$$\text{T.Φ. (O)} = 6 - 4 - \frac{1}{2} 4 = 0$$



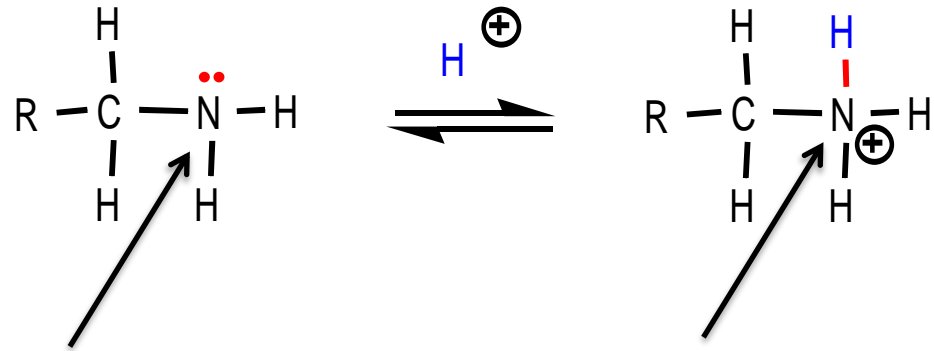
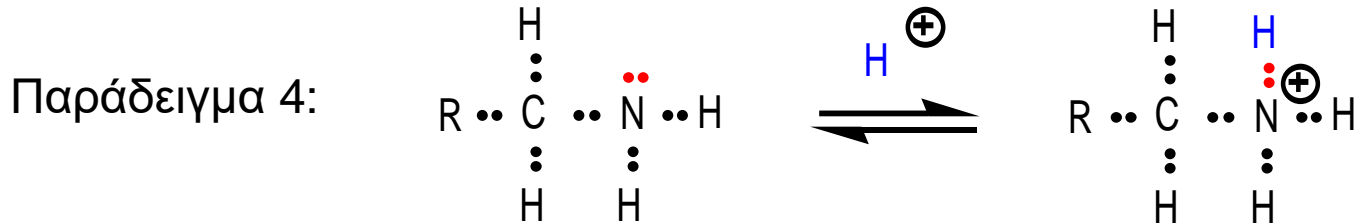
$$\text{T.Φ. (O)} = 6 - 6 - \frac{1}{2} 2 = -1$$

$$\text{Τυπικό φορτίο} = [n^{\circ} e^{-} \text{ σθένους}] - [n^{\circ} e^{-} \text{ αδεσμικά}] - [\frac{1}{2} n^{\circ} e^{-} \text{ δεσμικά}]$$

Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Σημεία που πρέπει να προσέχουμε

Να επαληθεύουμε και να σημειώνουμε σωστά τα **ηλεκτρόνια** και τα **φορτία**.



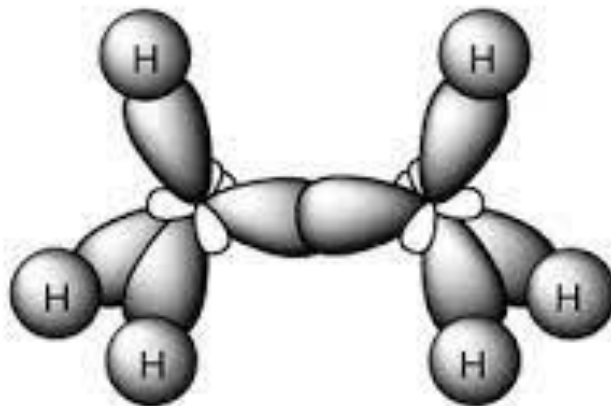
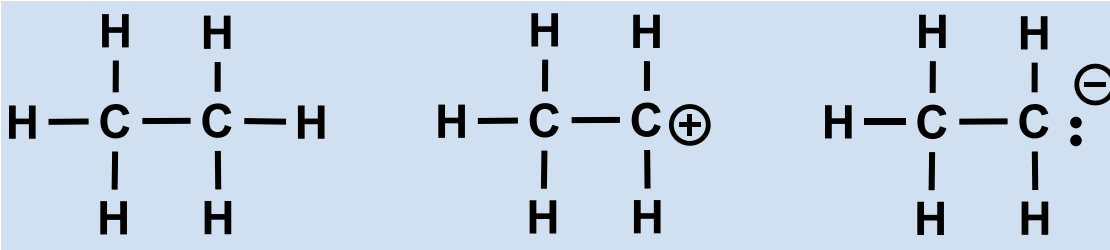
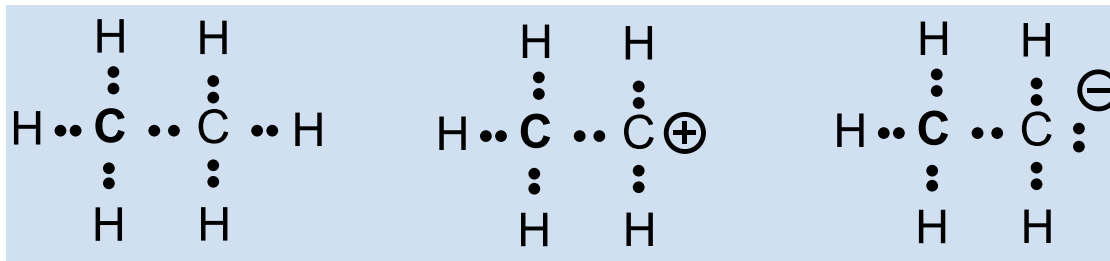
$$\text{T.}\Phi. (\text{N}) = 5 - 2 - \frac{1}{2} 6 = 0$$

$$\text{T.}\Phi. (\text{N}) = 5 - 0 - \frac{1}{2} 8 = +1$$

Τυπικό φορτίο = $[n^{\circ} e^{-} \text{ σθένους}] - [n^{\circ} e^{-} \text{ αδεσμικά}] - [\frac{1}{2} n^{\circ} e^{-} \text{ δεσμικά}]$

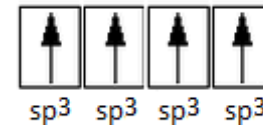
Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Παραδείγματα σχεδιασμού δομών Lewis των **βασικότερων χαρακτηριστικών ομάδων** με εφαρμογή του κανόνα οκτάδας και εύρεση τυπικού φορτίου.



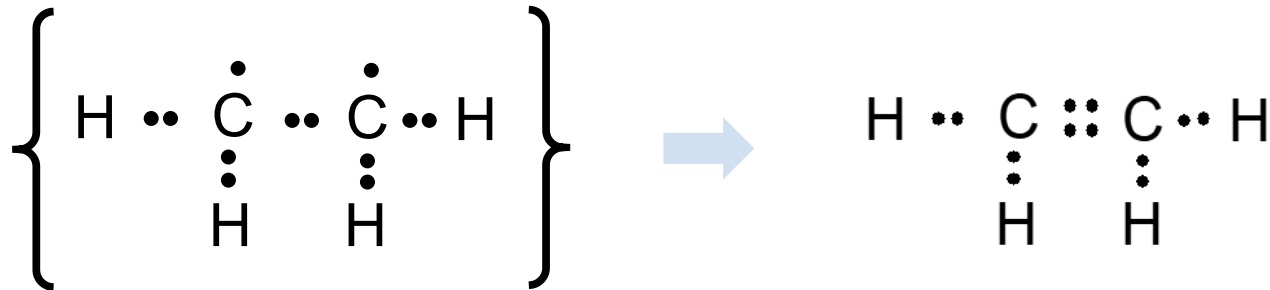
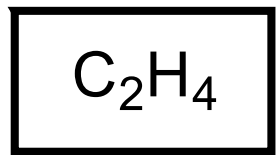
(sp³)

Πραγματικότητα !!

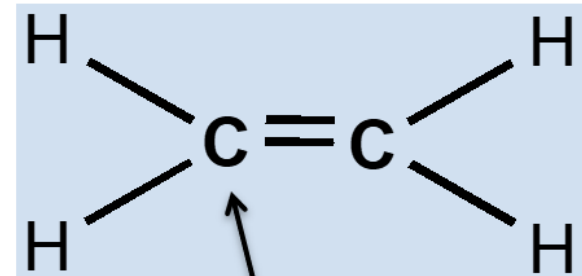
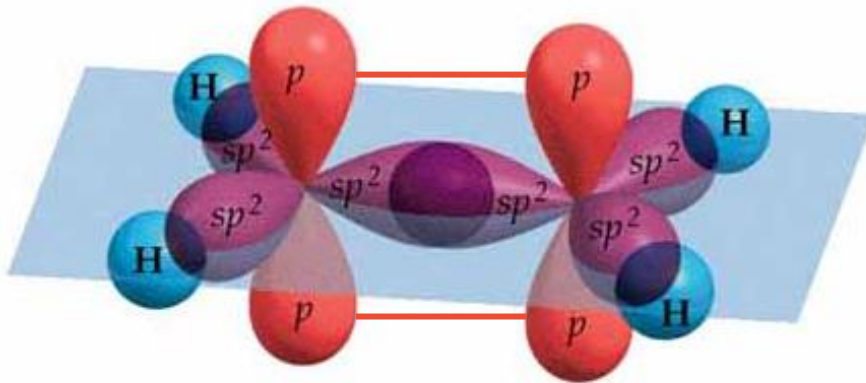


Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Παραδείγματα σχεδιασμού δομών Lewis των **βασικότερων χαρακτηριστικών ομάδων** με εφαρμογή του κανόνα οκτάδας και εύρεση τυπικού φορτίου.

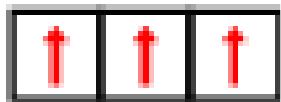


Πραγματικότητα !!



$$\text{T.Φ. (C)} = 4 - 0 - \frac{1}{2} 8 = 0$$

(sp²)



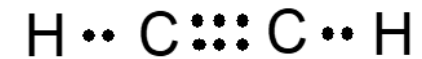
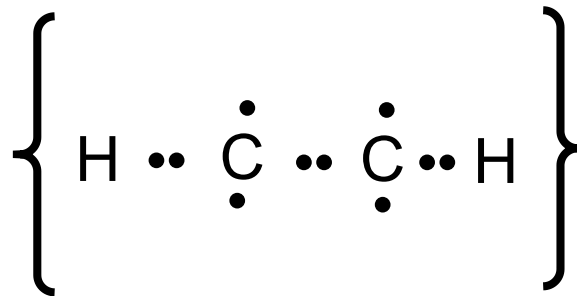
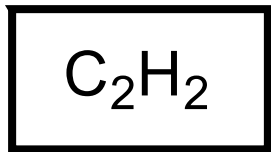
sp²



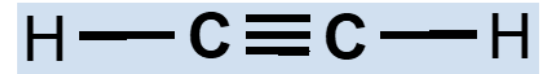
2p_z

Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

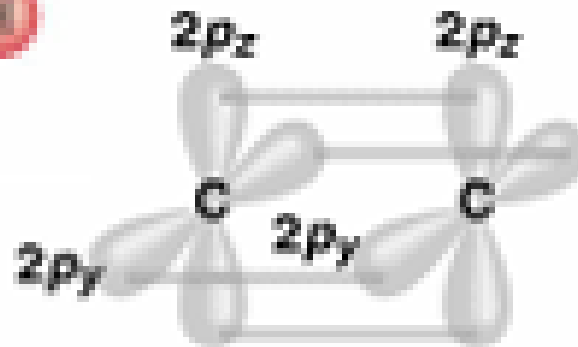
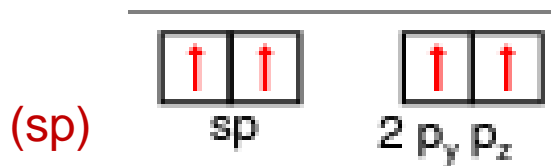
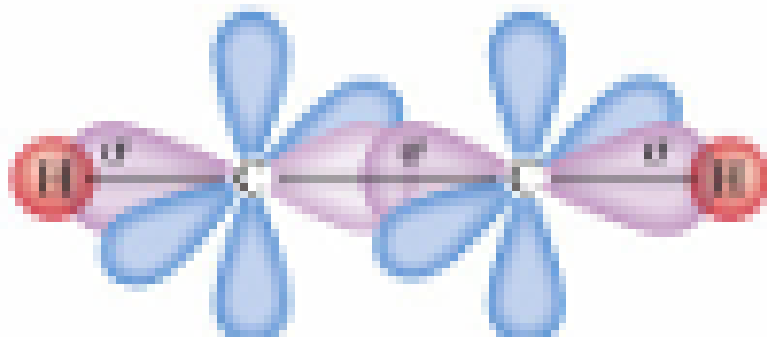
Παραδείγματα σχεδιασμού δομών Lewis των **βασικότερων χαρακτηριστικών ομάδων** με εφαρμογή του κανόνα οκτάδας και εύρεση τυπικού φορτίου.



Πραγματικότητα !!

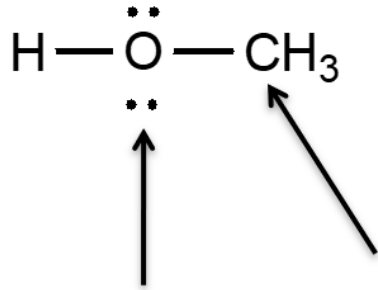


↑
 Τ.Φ. (C) = $4 - 0 - \frac{1}{2} 8 = 0$

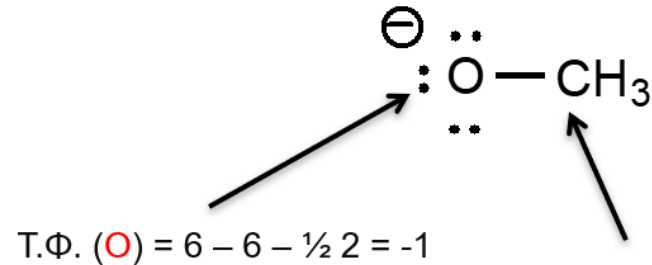


Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Παραδείγματα σχεδιασμού δομών Lewis των **βασικότερων χαρακτηριστικών ομάδων** με εφαρμογή του κανόνα οκτάδας και εύρεση τυπικού φορτίου.

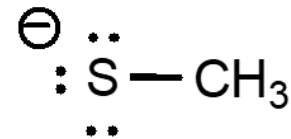
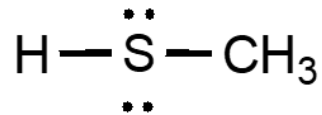


$$\text{T.Φ. (O)} = 6 - 4 - \frac{1}{2} 4 = 0 \quad \text{T.Φ. (C)} = 4 - 0 - \frac{1}{2} 8 = 0$$



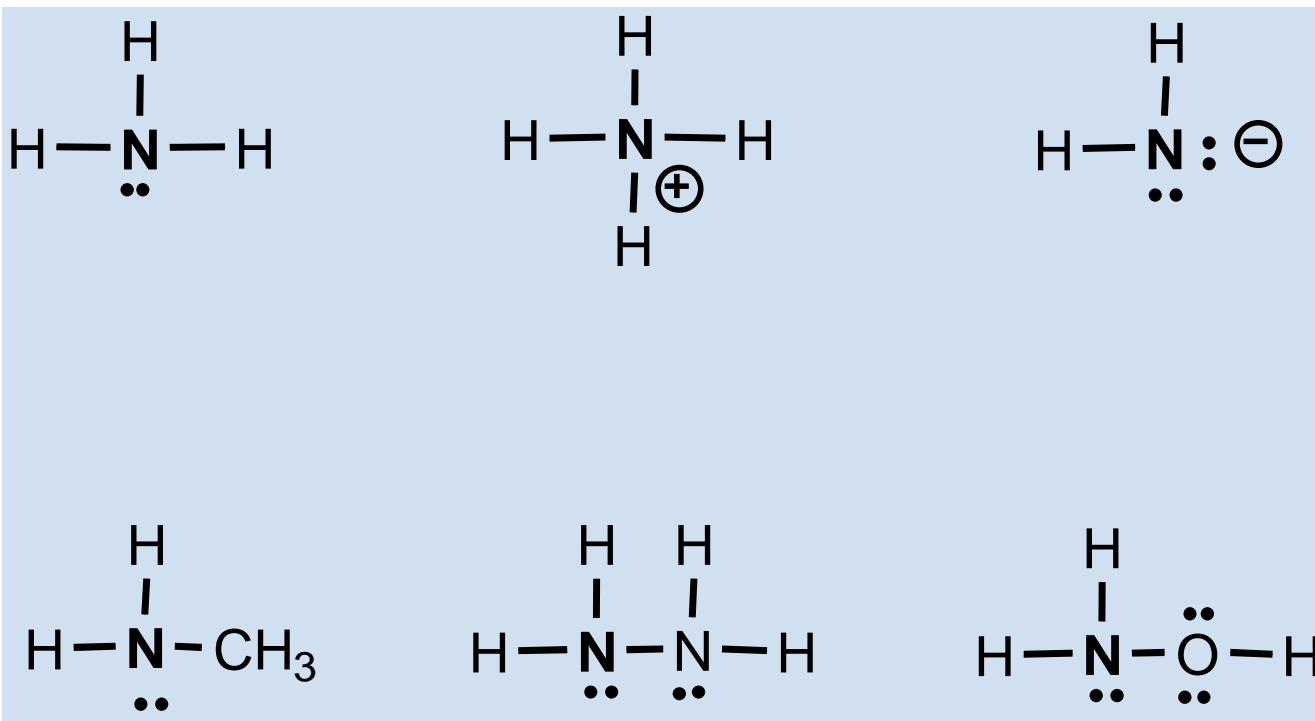
$$\text{T.Φ. (O)} = 6 - 6 - \frac{1}{2} 2 = -1$$

$$\text{T.Φ. (C)} = 4 - 0 - \frac{1}{2} 8 = 0$$



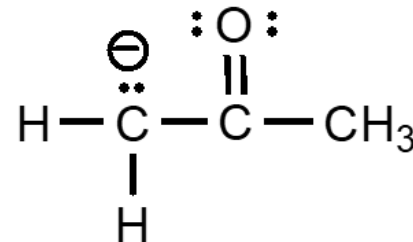
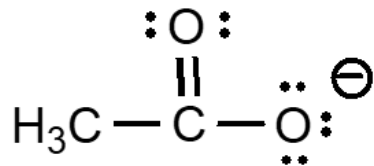
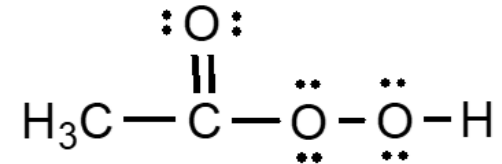
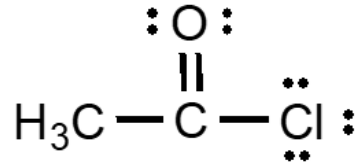
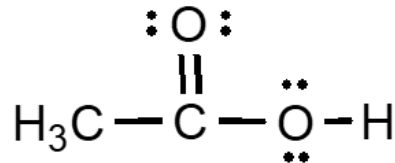
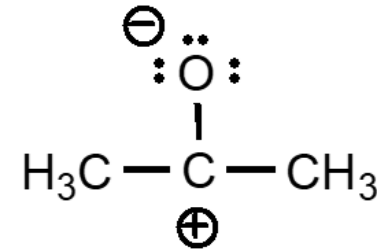
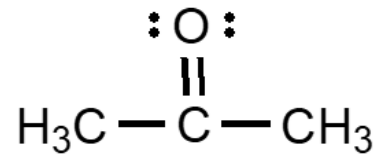
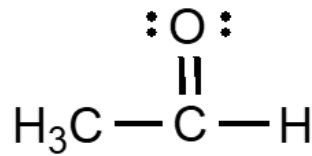
Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Παραδείγματα σχεδιασμού δομών Lewis των **βασικότερων χαρακτηριστικών ομάδων** με εφαρμογή του κανόνα οκτάδας και εύρεση τυπικού φορτίου.



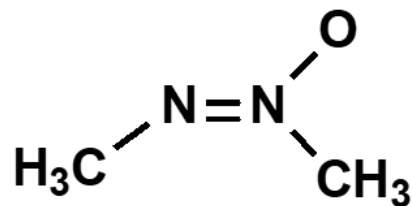
Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Παραδείγματα σχεδιασμού δομών Lewis των **βασικότερων χαρακτηριστικών ομάδων** με εφαρμογή του κανόνα οκτάδας και εύρεση τυπικού φορτίου.



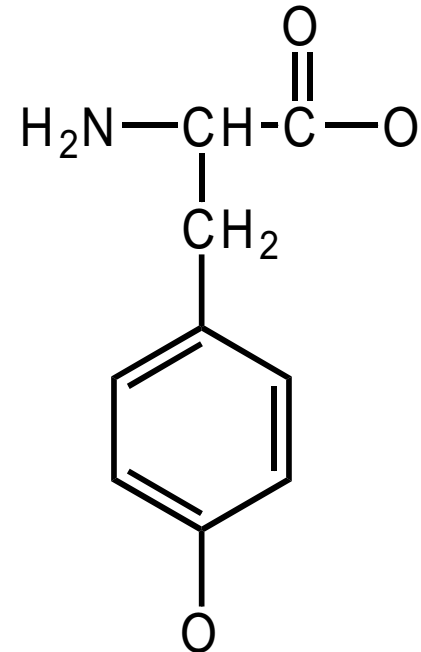
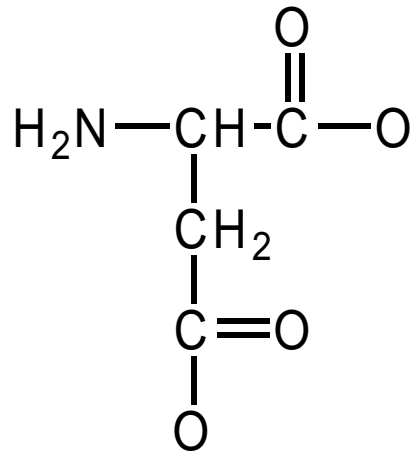
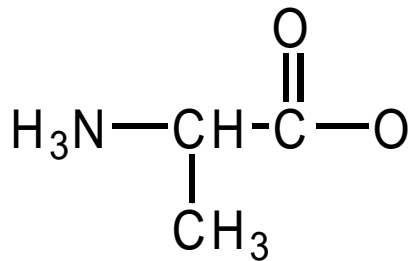
Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

Άσκηση 1.1: Να συμπληρωθούν τα μη δεσμικά e⁻ και τα φορτία ώστε να προκύψουν πλήρεις δομές Lewis.

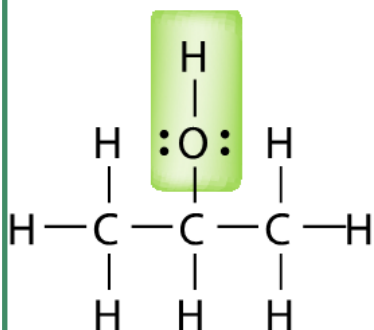
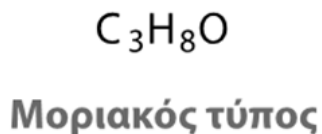


Χημικές Δομές (Κατά Lewis)

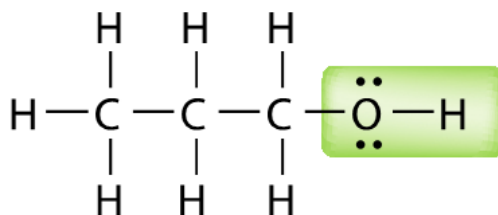
Άσκηση 1.2: Τα αμινοξέα είναι σημαντικές οργανικές ενώσεις των οποίων η χημική δραστηριότητα αλλά και οι ιδιότητές τους γενικότερα εξαρτάται και από τη χημική μορφή των ομάδων τους. Σημειώστε **τα μη δεσμικά ηλεκτρόνια και τα τυπικά φορτία που λείπουν στις χαρακτηριστικές ομάδες** των παρακάτω αμινοξέων (Ala, Asp, Tyr), ώστε να προκύψουν πλήρεις δομές Lewis.



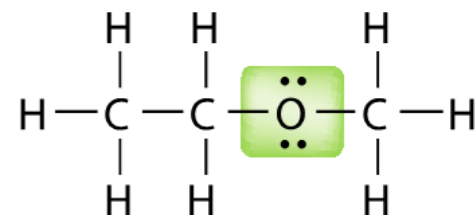
Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές



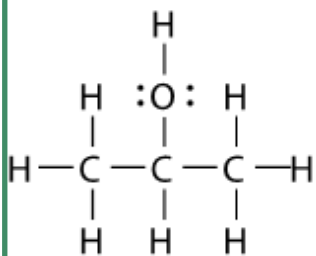
Ισοπροπανόλη



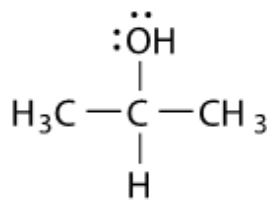
Προπανόλη



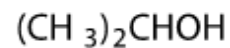
Αίθυλο μέθυλο αιθέρας



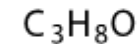
Δομή Lewis



Μερικώς συμπυκνωμένη δομή



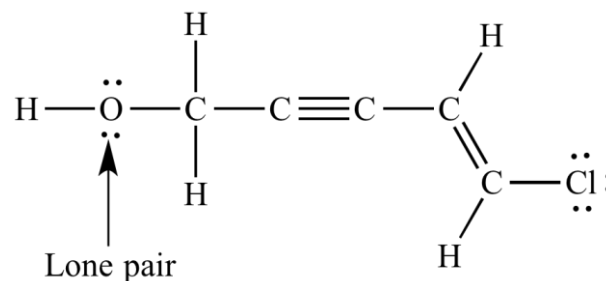
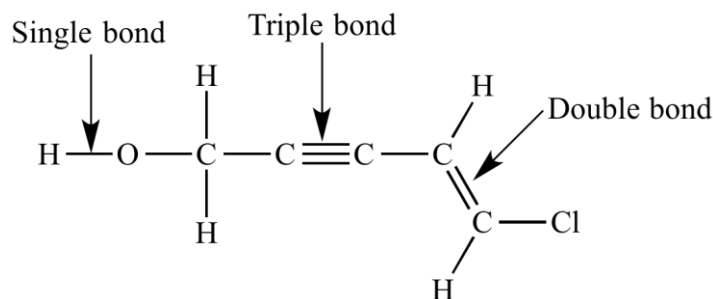
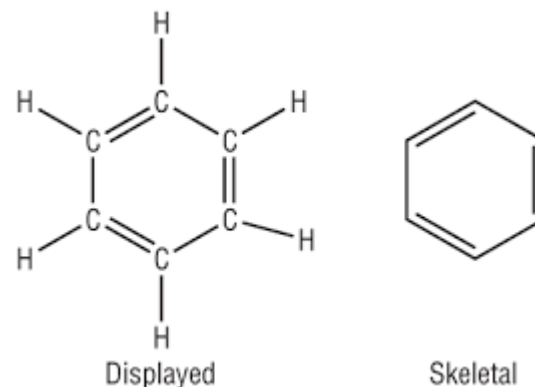
Συμπυκνωμένη δομή



Μοριακός τύπος

Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

Kekulé (1866) πρότεινε μια λογική δομή για το βενζόλιο. Οι άνθρακες είναι διατεταγμένοι σε έναν εξάγωνο και υπάρχουν εναλλασσόμενοι διπλοί και απλοί δεσμοί μεταξύ τους. Κάθε άτομο άνθρακα έχει ένα υδρογόνο συνδεδεμένο σε αυτό.



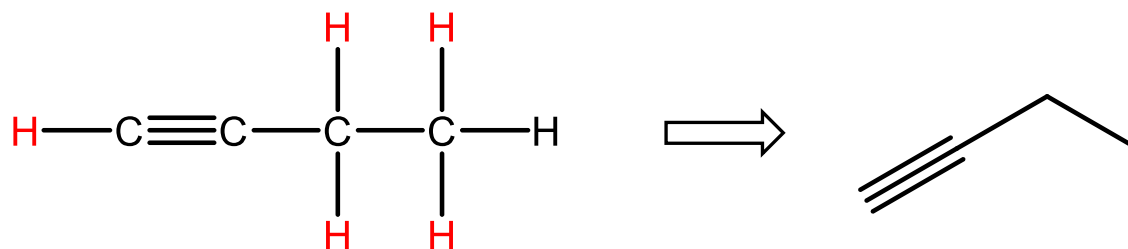
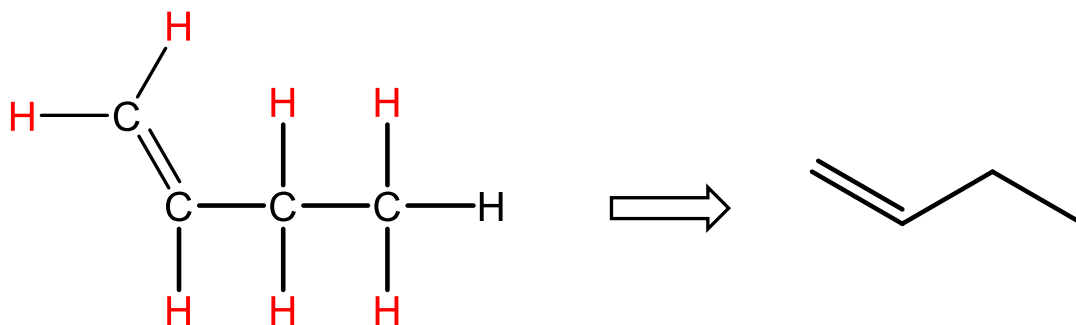
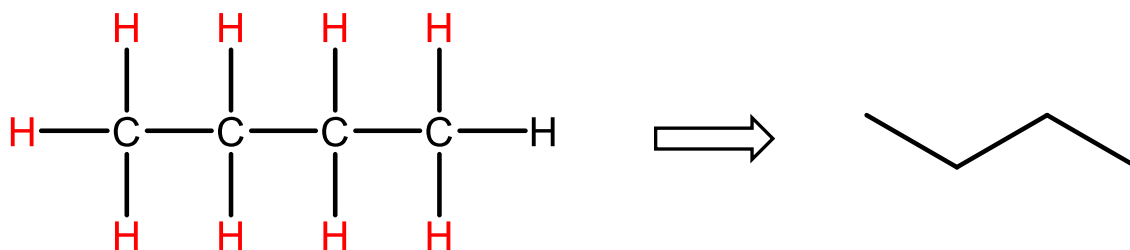
Τυπική δομή **Kekulé'**
Δεν περιλαμβάνει μονήρη ζεύγη e⁻

Αντίστοιχη δομή **Lewis**
Τα μονήρη ζεύγη e⁻ παρουσιάζονται

Ηλεκτρόνια σθένους που δε χρησιμοποιούνται σε δεσμούς ονομάζονται αδесμικά (μη δεσμικά) ή μονήρη e⁻ και ομοίως περιγράφονται με τελείες.

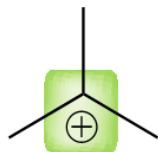
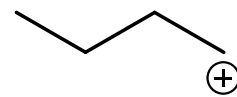
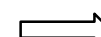
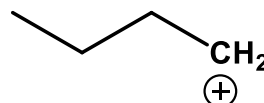
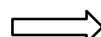
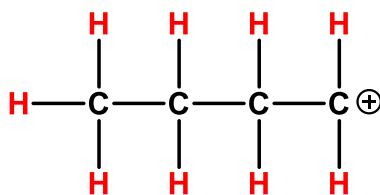
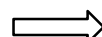
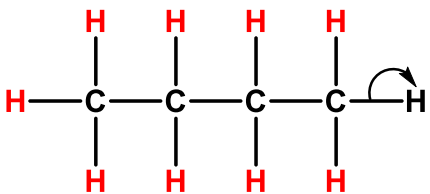
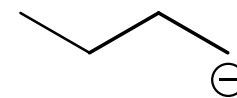
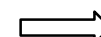
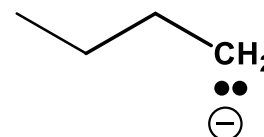
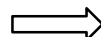
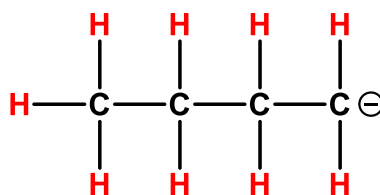
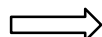
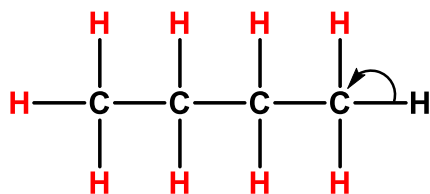
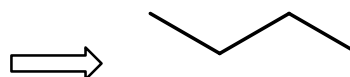
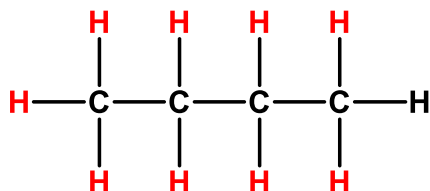
Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

Τα άτομα H δεν απεικονίζονται, ωστόσο πρέπει να υποθέσουμε ότι υπάρχουν αρκετοί δεσμοί για να συμπληρώσουν την οκτάδα (4 δεσμοί) κάθε ατόμου άνθρακα.



Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

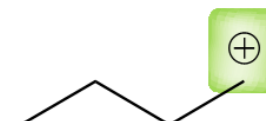
Προσοχή στα φορτία



Κανένα άτομο υδρογόνου σε αυτό το C⁺



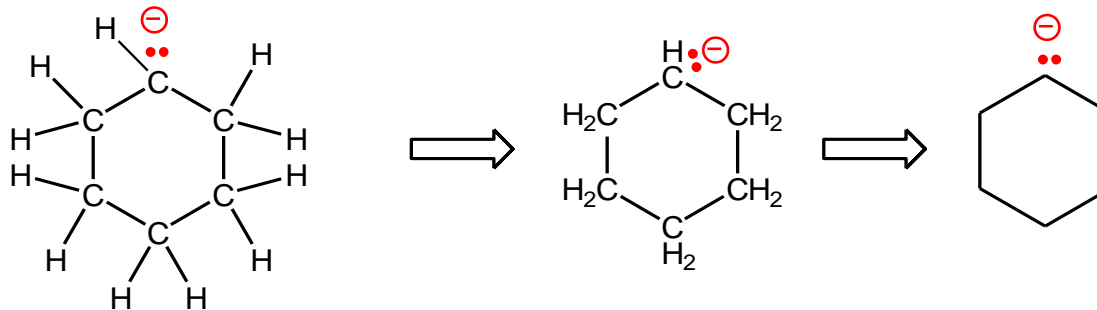
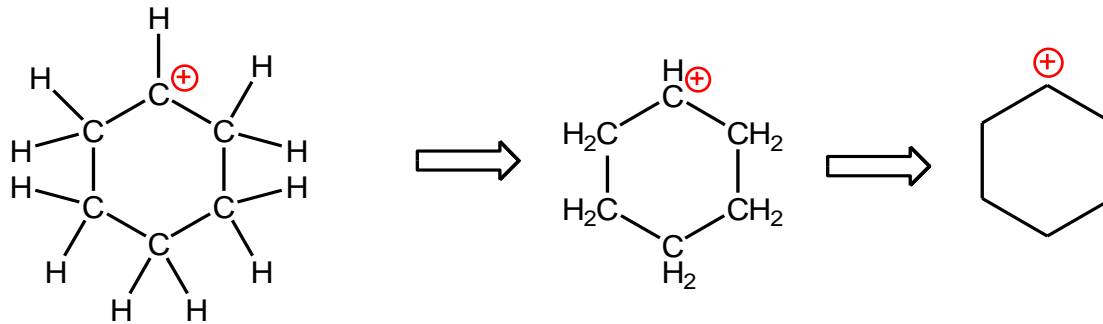
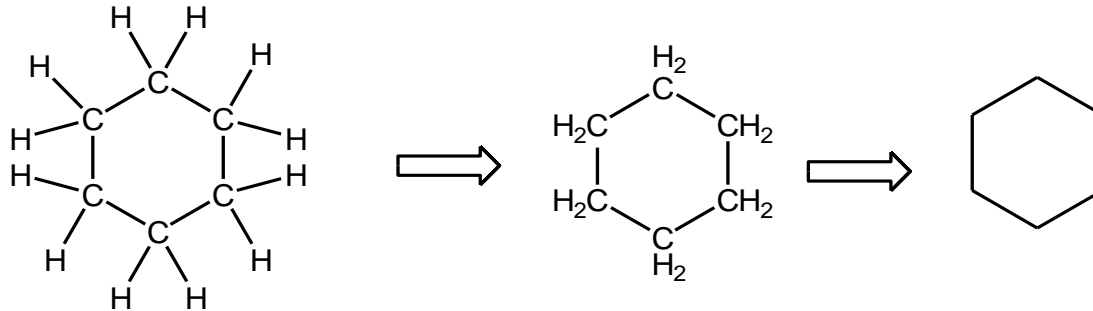
Ένα άτομο υδρογόνου σε αυτό το C⁺



Δύο άτομα υδρογόνου σε αυτό το C⁺

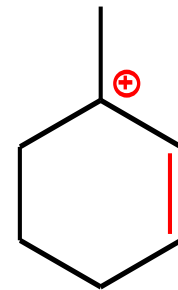
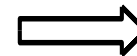
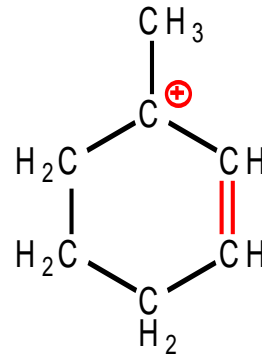
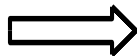
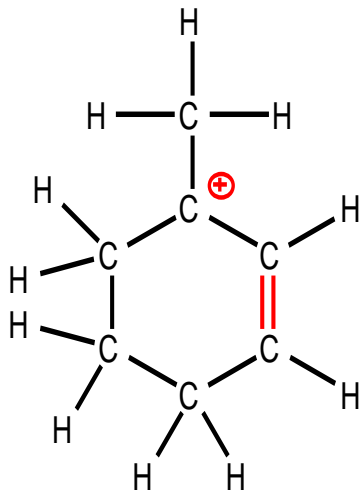
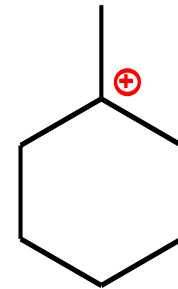
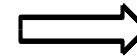
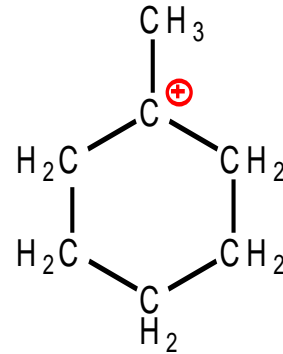
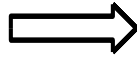
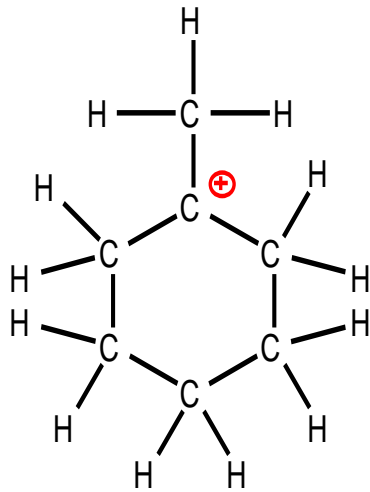
Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

Προσοχή στα φορτία



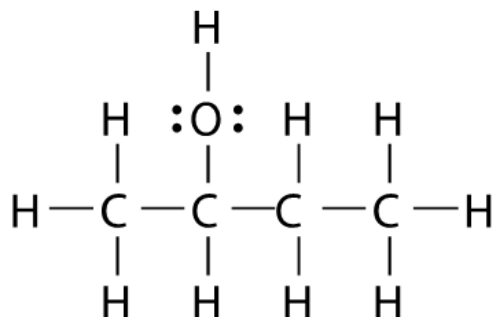
Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

Προσοχή στα φορτία



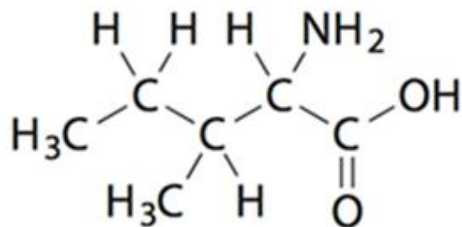
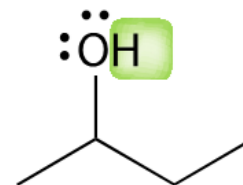
Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

Προσοχή εάν υπάρχουν ετεροάτομα (λειτουργικές ομάδες)

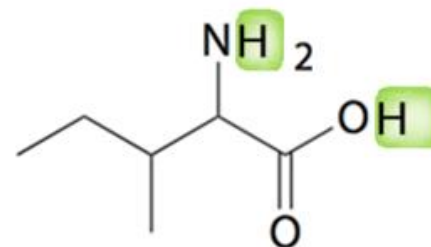


σχεδιάζεται ως εξής:

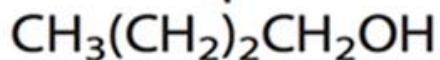
Αυτό το H
πρέπει να σχεδιαστεί:



απλοποιείται σε



ή



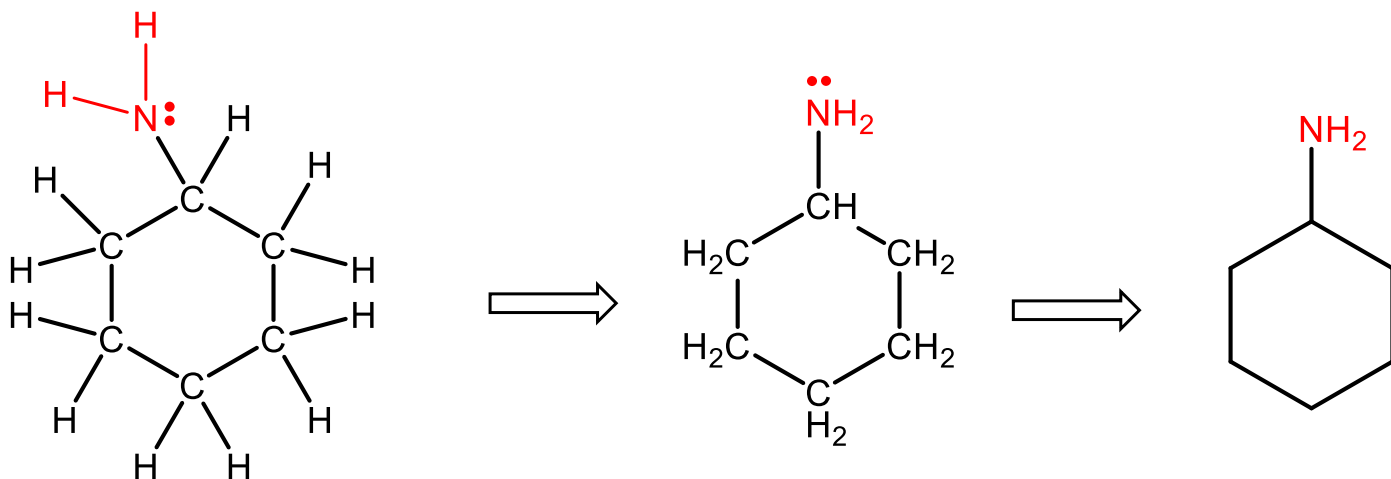
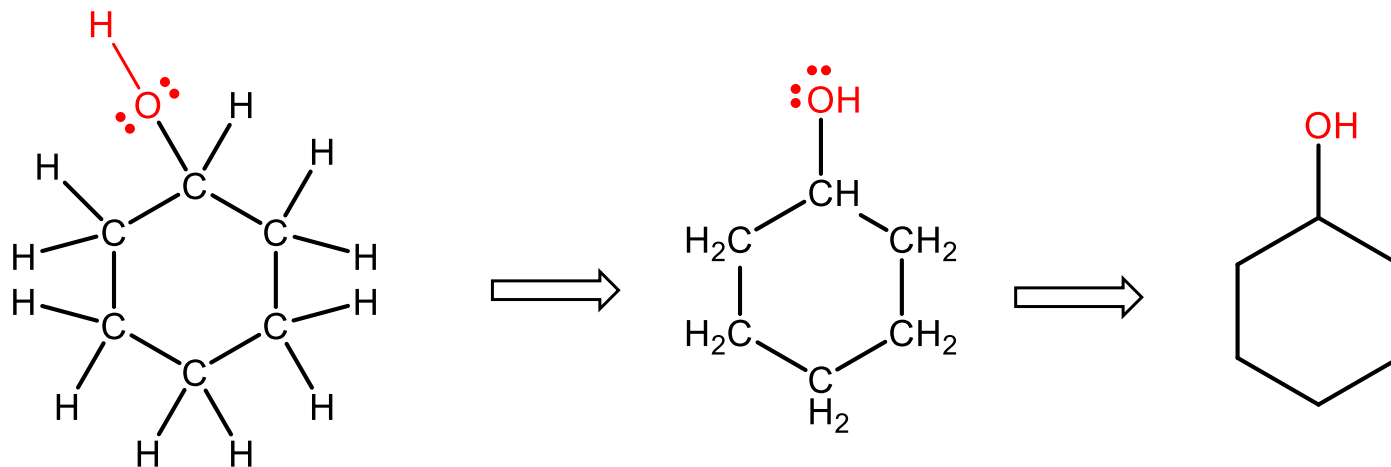
Συμπυκνωμένος τύπος

απλοποιείται σε



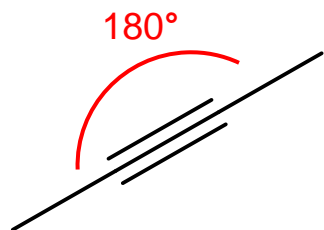
Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

Προσοχή εάν υπάρχουν ετεροάτομα (λειτουργικές ομάδες)



Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

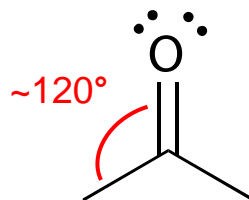
Προσοχή στις γωνίες των δεσμών (υβριδισμός)



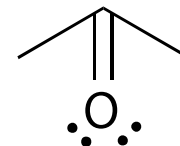
correct



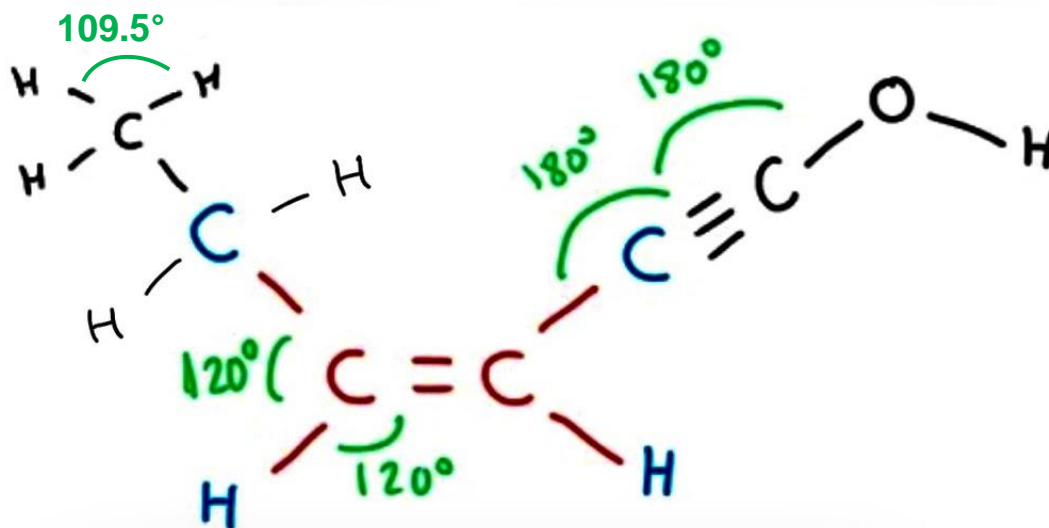
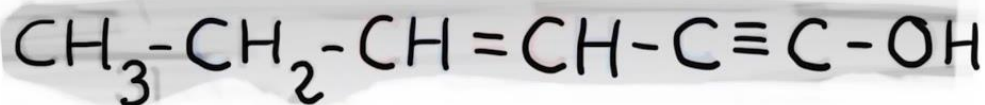
incorrect



correct

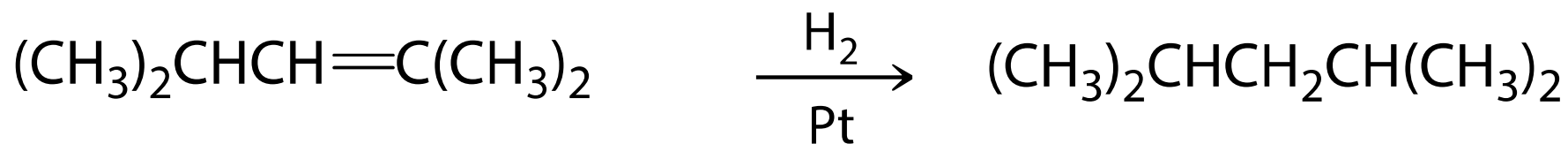


incorrect

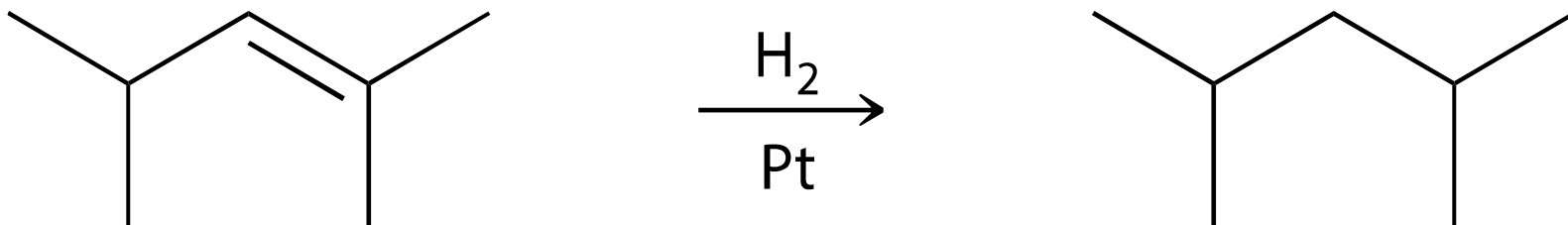


Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

Παράδειγμα 1.1: Σχεδιάστε την παρακάτω αντίδραση χρησιμοποιώντας σκελετικές δομές.



Απάντηση



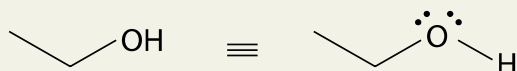
Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

Παράδειγμα 1.2: Σχεδιάστε τις αντίστοιχες δομές όπου εμφανίζονται τα μονήρη e⁻ (δομές κατά Lewis), για κάθε παράδειγμα.

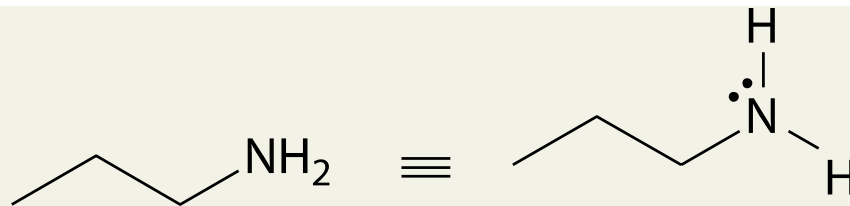
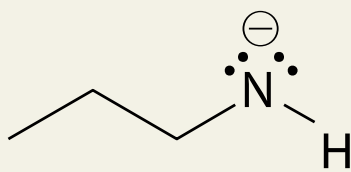
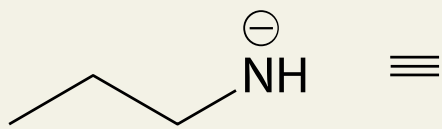
Παράδειγματα:



Παράδειγματα:



Παράδειγματα:

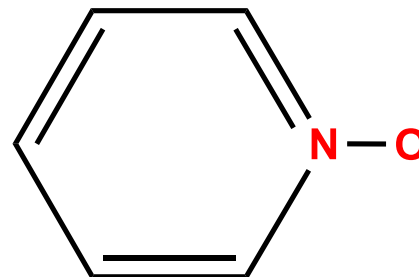
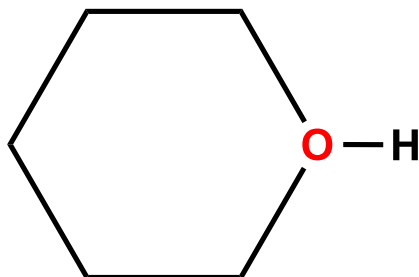
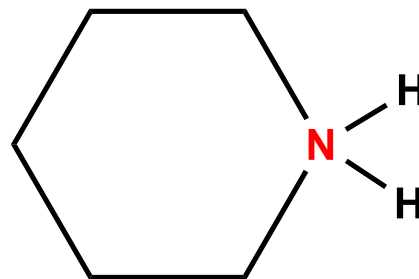
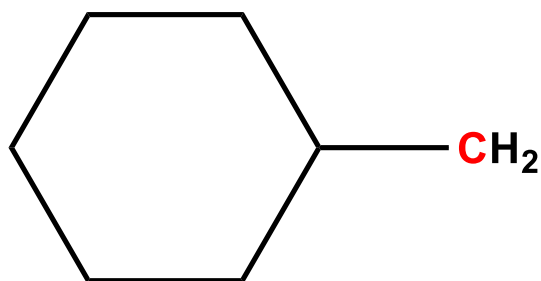


Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

Άσκηση 1.3: Παρατηρείστε τις παρακάτω σκελετικές δομές.

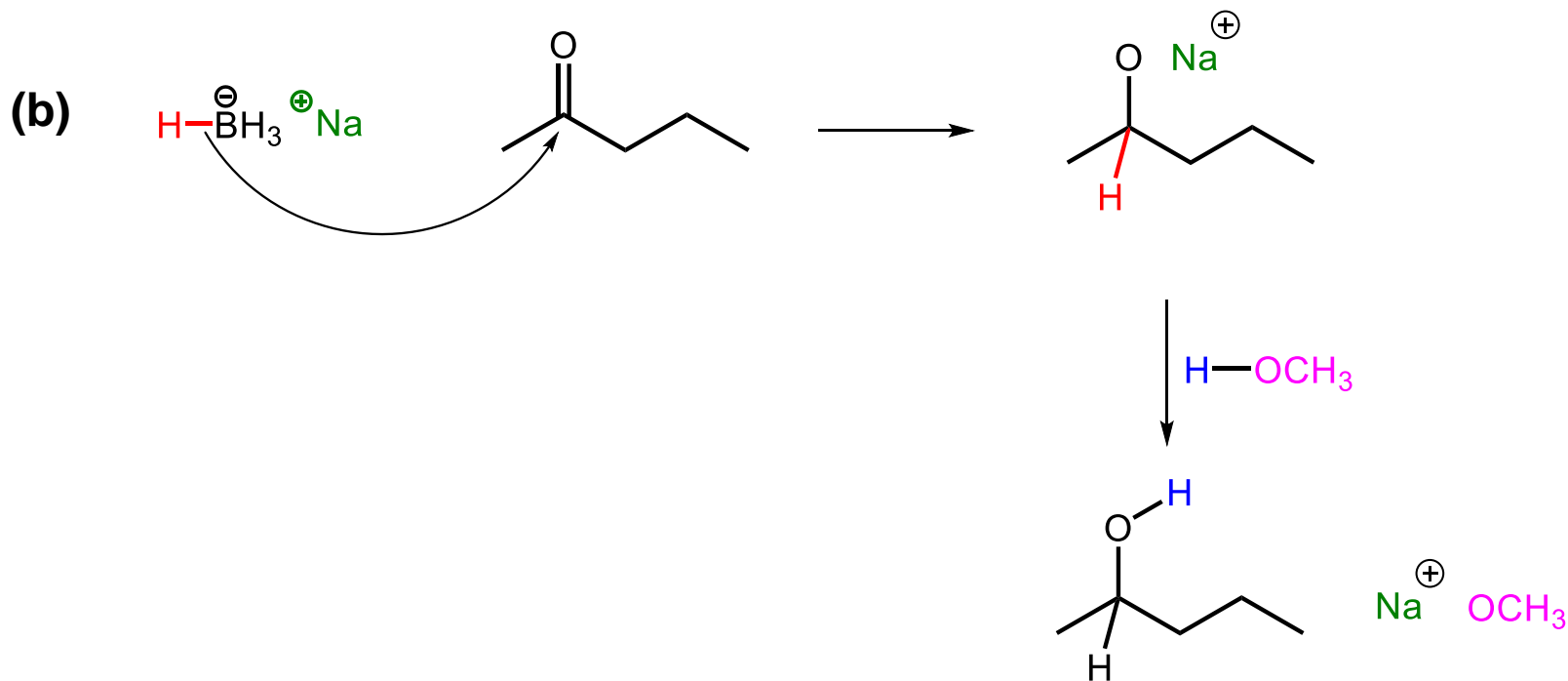
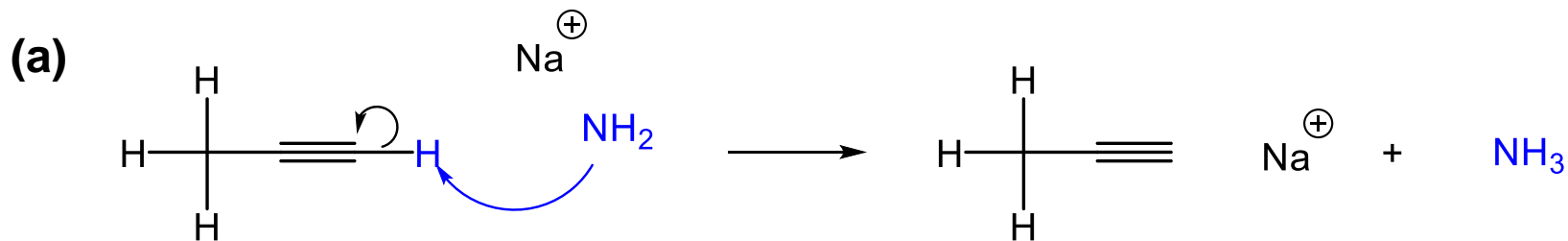
(a) Υποδείξτε εάν και πού λείπουν e⁻ ώστε να έχετε **πλήρεις δομές Lewis**.

(b) Υπολογίστε το **τυπικό φορτίο** και δείξτε το για τα άτομα που φαίνονται με κόκκινο χρώμα.

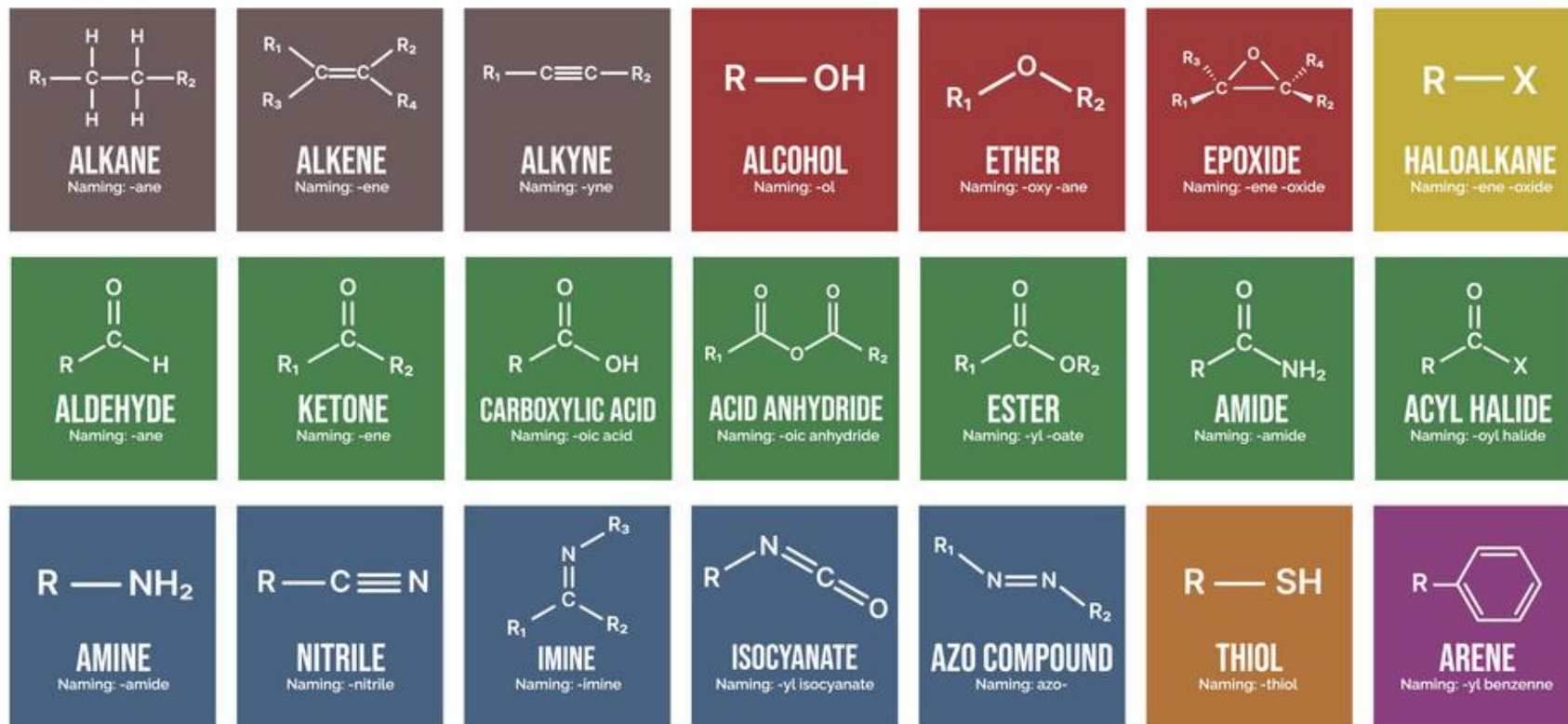


Μοριακές Δομές – Σκελετικές δομές

Άσκηση 1.4: Σημειώστε τα μη δεσμικά ηλεκτρόνια και τα φορτία που λείπουν σε κάθε στάδιο της παρακάτω αντίδρασης, ώστε να είναι πλήρεις οι δομές Lewis.



FUNCTIONAL GROUPS IN ORGANIC CHEMISTRY



Hydrocarbons
Oxygen heteroatomics
Halogen heteroatomics
Carbonyl compounds
Nitrogen-based compounds
Sulfur containing
Aromatics