

Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Κύρια Δομή Συντονισμού

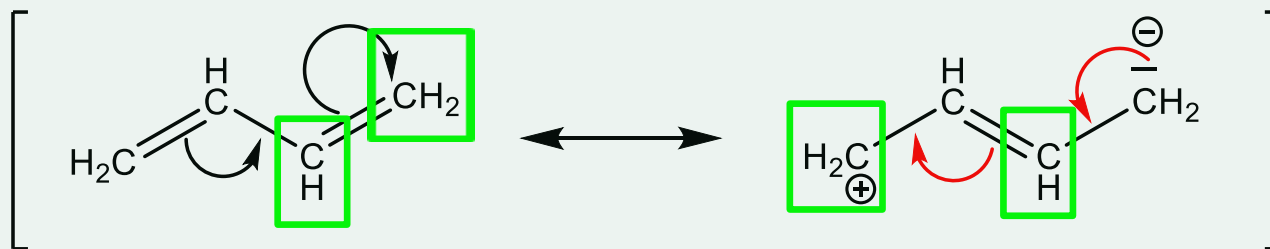
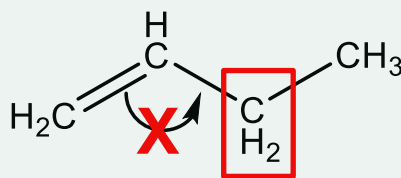
- ✓ Αυτή με όσο το δυνατόν περισσότερες οκτάδες.
- ✓ Αυτή που δεν παρουσιάζει τυπικά φορτία.
- ✓ Εάν υπάρχουν τυπικά φορτία, να είναι όσο το δυνατόν μικρότερα και να τοποθετούνται τα αρνητικά φορτία στα πιο ηλεκτραρνητικά άτομα και τα θετικά φορτία στα πιο ηλεκτροθετικά άτομα.
- ✓ Αυτή που έχει τη μικρότερη δυνατή απόσταση διαχωρισμού φορτίων αντίθετου πρόσημου.

Η κύρια δομή «αντιπροσωπεύει καλύτερα την αληθινή δομή», επομένως συμβάλλει περισσότερο στο υβρίδιο συντονισμού.

Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Παραδείγματα μετακινήσεων e-

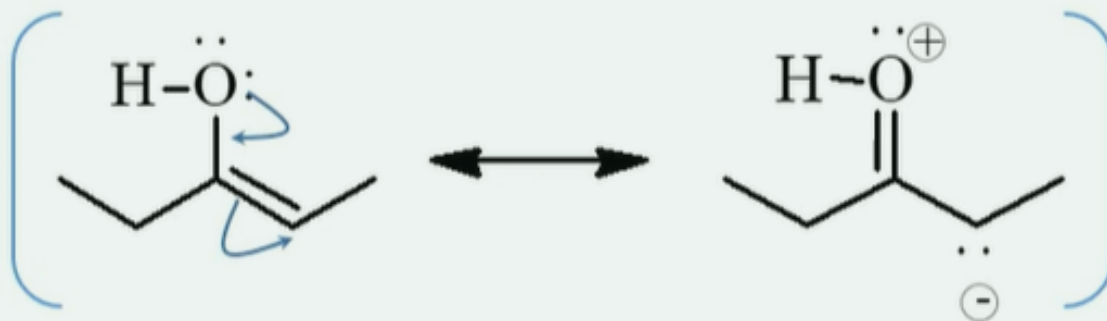
- Μετακίνηση e- π -δεσμών (sp^2/sp) και όχι e- σ -δεσμών (sp^3)
- Μετακίνηση μονήρη ζεύγη e-



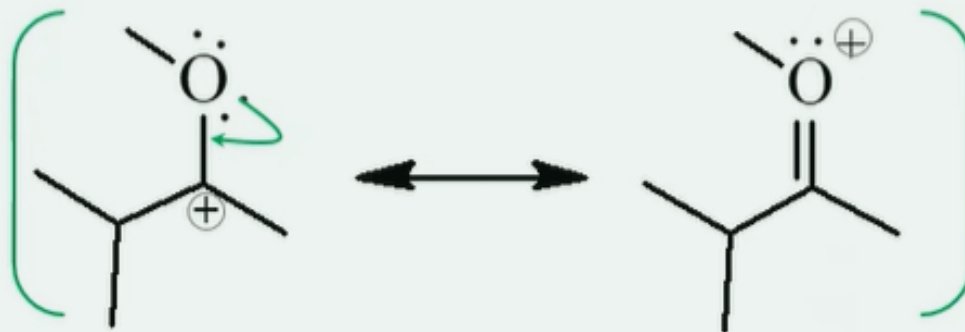
Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Παραδείγματα μετακινήσεων e^-

- Μονήρες ζεύγος e^- δίπλα σε π -δεσμό



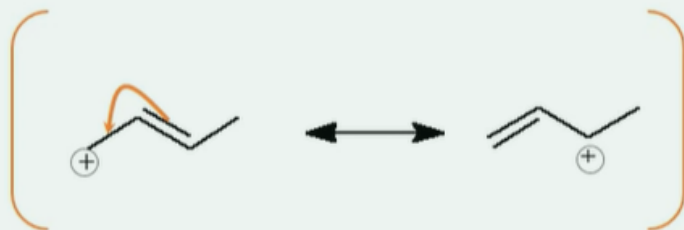
- Μονήρες ζεύγος e^- δίπλα σε άτομο με θετικό φορτίο



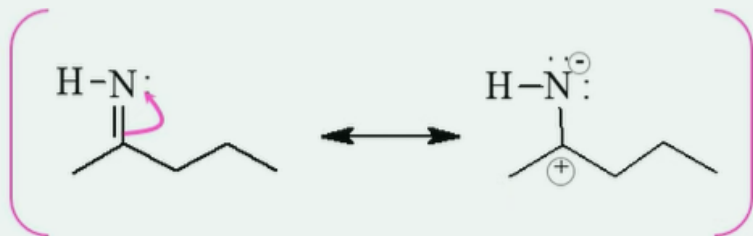
Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Παραδείγματα μετακινήσεων e^-

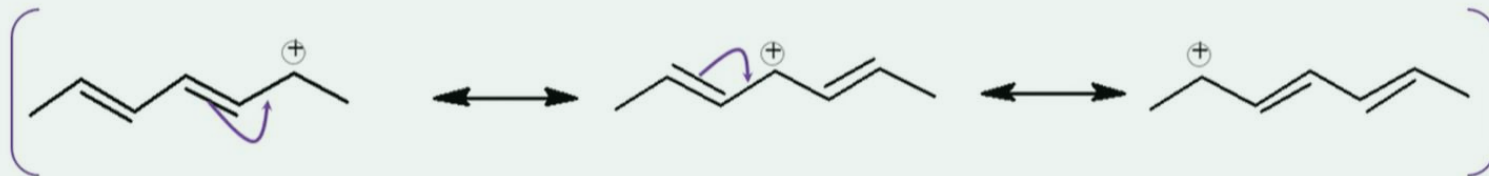
- π - e^- δίπλα σε άτομο με θετικό φορτίο



- π - e^- μεταξύ δύο ατόμων, με το ένα πιο ηλεκτραρνητικό από το άλλο



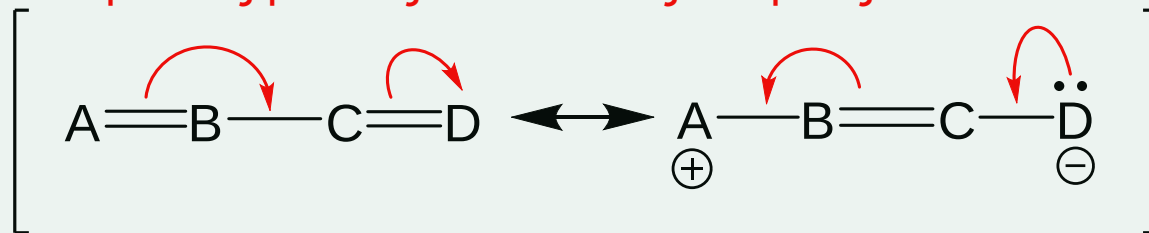
- π - e^- σε συζυγιακό σύστημα (π.χ. με εναλλασσόμενους διπλούς και απλούς δεσμούς)



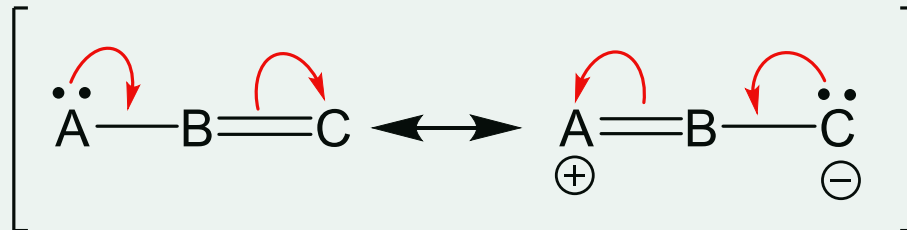
Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Κατά τον **συντονισμό**, τα ηλεκτρόνια απεντοπίζονται, συνήθως, σε ένα **συζυγιακό σύστημα**. Κύριες μετακινήσεις:

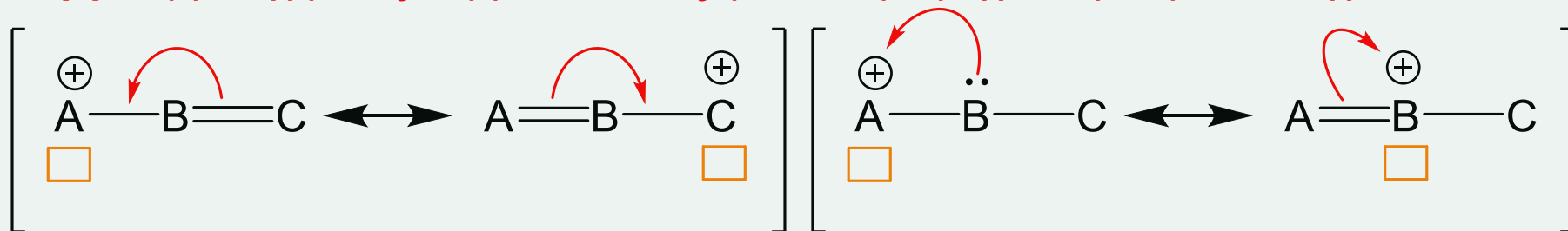
(1) Σε εναλλασσόμενους μονούς και διπλούς δεσμούς.



(2) Συμμετοχή ενός μονήρους ζεύγους ηλεκτρονίων.



(3) Συμμετοχή ενός καρβοκατιόντος (το κενό *p*-τροχιακό μπορεί να δέχεται e^-).



Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

ΠΑΡΑΤΗΡΗΣΕΙΣ ΣΤΙΣ ΔΟΜΕΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΥ

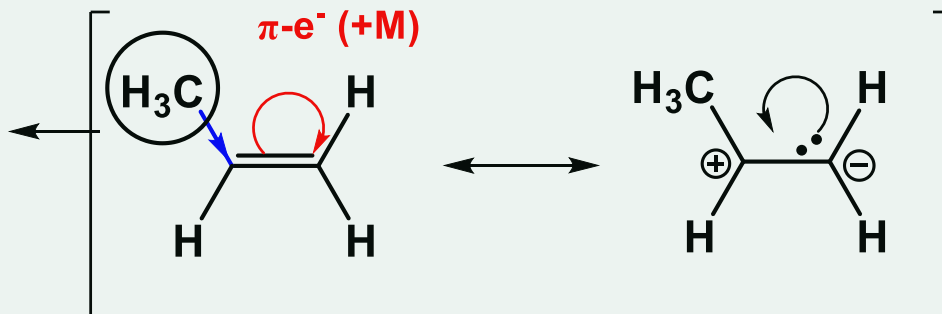
- Οι δομές συντονισμού **διαφέρουν μόνο στην κατανομή των π και των μη δεσμικών ηλεκτρονίων τους** (έχουν την ίδια συνδεσιμότητα μεταξύ των ατόμων).
- Οι δομές συντονισμού θα πρέπει να είναι **ορθές δομές κατά Lewis** και να υπακούουν στους τυπικούς κανόνες διατήρησης του σθένους, *κανόνας της οκτάδας* (**συνήθης εξαίρεση: C^+**).
- Οι διαφορετικές δομές συντονισμού μίας ένωσης δεν είναι απαραίτητα ισοδύναμες (σταθερότητα): **κυρίες και δευτερεύουσες**, που συμβάλλουν αντίστοιχα στο υβρίδιο συντονισμού (*major / minor contributor*).
- Οι μεμονωμένες δομές συντονισμού **δεν υφίστανται στην πραγματικότητα** (Η ένωση είναι **υβρίδιο** όλων των πιθανών δομών συντονισμού).
- Το υβρίδιο συντονισμού (**αύξηση σταθερότητας = χαμηλότερη συνολική ενέργεια**) είναι περισσότερο σταθερό από οποιαδήποτε μεμονωμένη δομή συντονισμού.
 - Όσο **πιο σταθερή** είναι μία δομή τόσο συντονισμού **μεγαλύτερη** είναι η **συνεισφορά** της στο τελικό **υβρίδιο**.
 - Συνήθως, όσο **περισσότερες** είναι οι εναλλακτικές **δομές συντονισμού**, τόσο **πιο σταθερό** είναι το **υβρίδιο συντονισμού** (η ένωση).
 - Ο **αποεντοπισμός των e^-** κατανέμει την **πυκνότητα ηλεκτρονίων πιο ομοιόμορφα** σε όλο το μόριο, κάτι που είναι **ενεργειακά ευνοϊκό**.

Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ ΕΠΑΓΩΓΗΣ (-I, +I)	ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΥ ή ΜΕΣΟΜΕΡΕΙΑΣ (-M, +M / -R, +R)
1) Μετατόπιση e^- μέσω σ-δεσμούς . (κορεσμένες ενώσεις)	1) Μετακίνηση e^- μέσω π-δεσμούς .
2) Μετατοπίζονται τα δεσμικά σ-e^- <u>λόγω της διαφοράς στην ηλεκτραρνητικότητα των γειτονικών ατόμων</u> .	2) Μετακινούνται τα δεσμικά π-e^- και/ή μονήρη ζεύγη e^- (νέφος π - e^-).
3) Τα e^- μετατοπίζονται από τη θέση τους και έτσι αναπτύσσονται μερικά φορτία (δ) .	3) Τα e^- μεταφέρονται πλήρως και έτσι αναπτύσσονται πλήρη θετικά και αρνητικά φορτία .
4) Ισχύει έως και τρεις γειτονικούς δεσμούς , μετά τους οποίους η πόλωση είναι αμελητέα.	4) Μετακίνηση προς άτομα με υβριδισμό sp^2 () / sp () , χωρίς να αποδυναμώνει σε όλο το συζυγιακό σύστημα . Ο απλός δεσμός (sp^3) αποτρέπει τον συντονισμό .

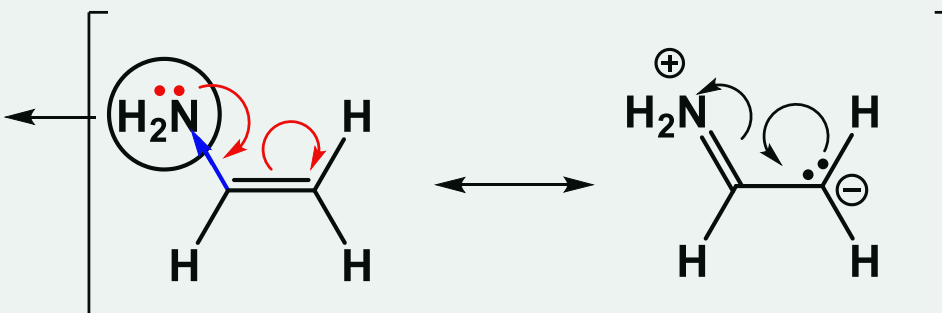
Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Δίνει e^- με επαγωγή (+I)



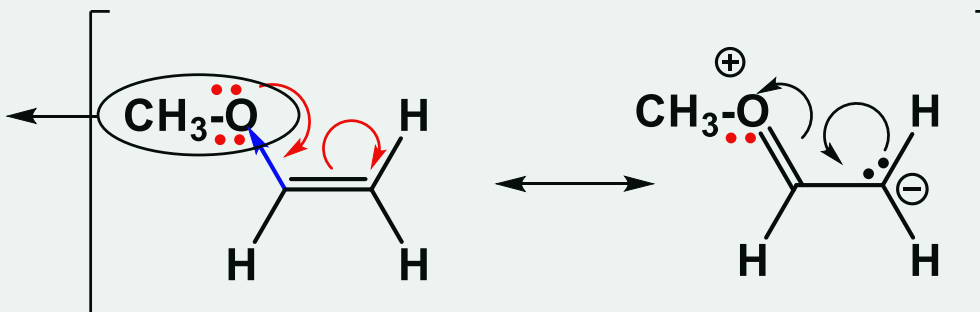
Έλκει e^- με επαγωγή (-I)

Δίνει e^- με μεσομέρεια (+M)



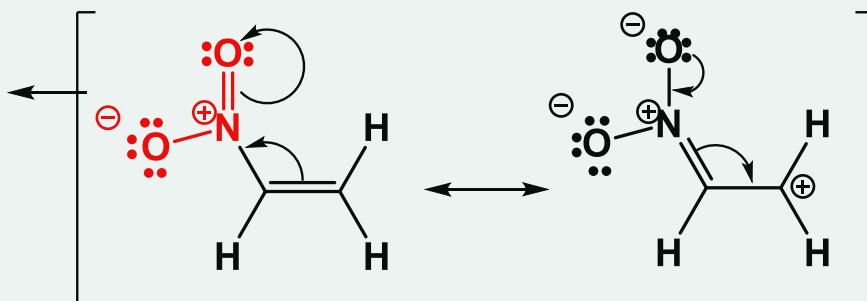
Έλκει e^- με επαγωγή (-I)

Δίνει e^- με μεσομέρεια (+M)

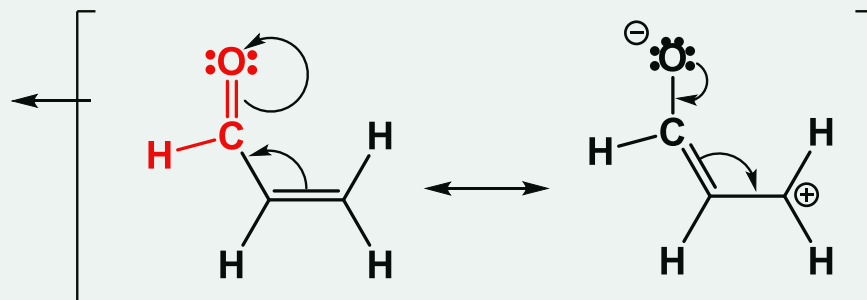


Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

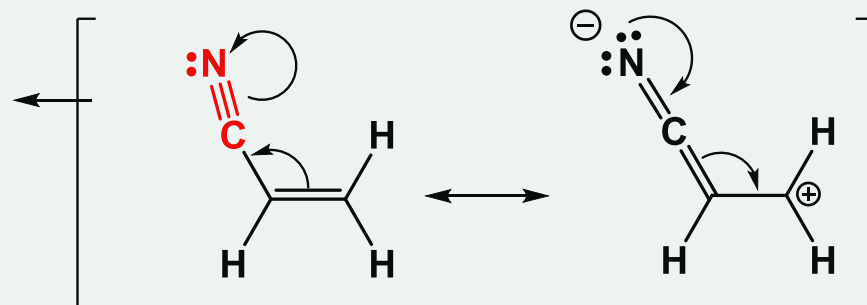
Έλκει e^- με
μεσομέρεια (-M)



Έλκει e^- με
μεσομέρεια (-M)



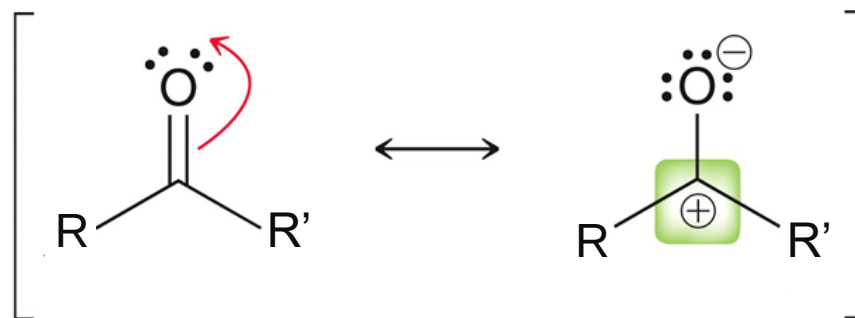
Έλκει e^- με
μεσομέρεια (-M)



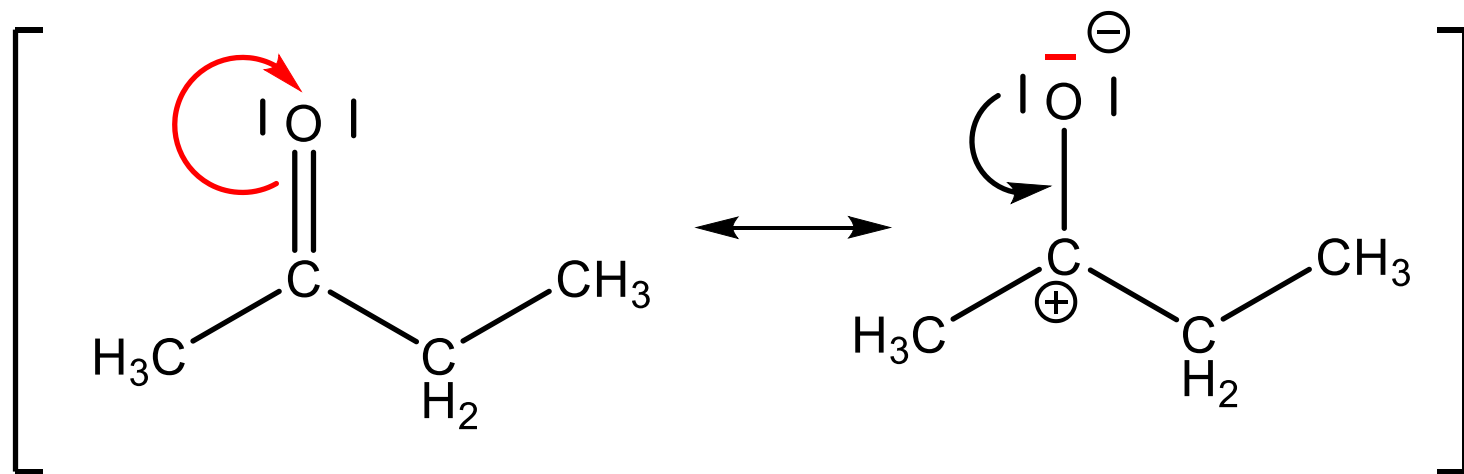
Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Αλδεΐδες (R και/ή R' = H)

Κετόνες (R, R' = αλκυλο)

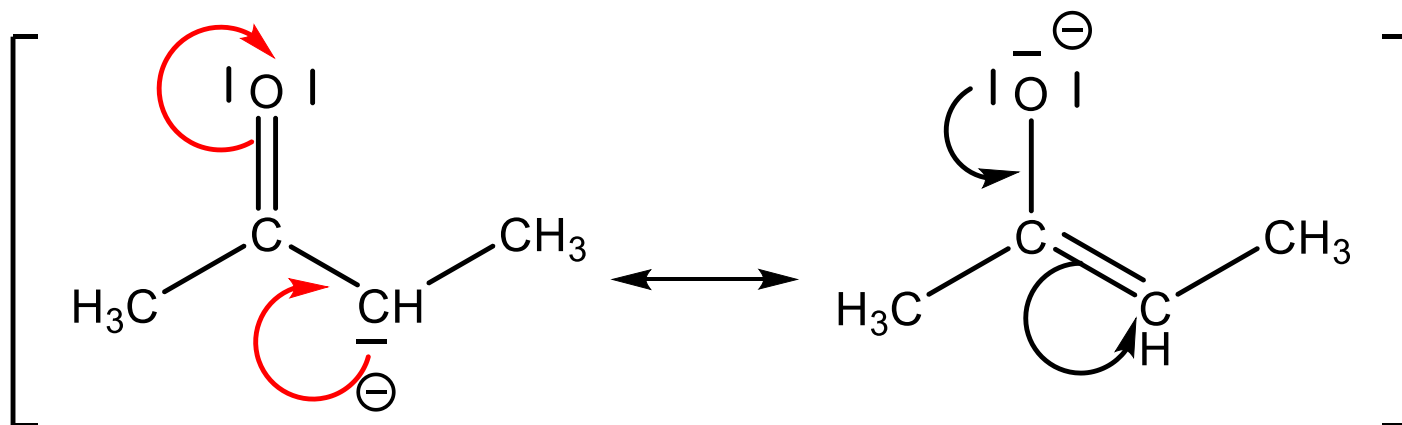
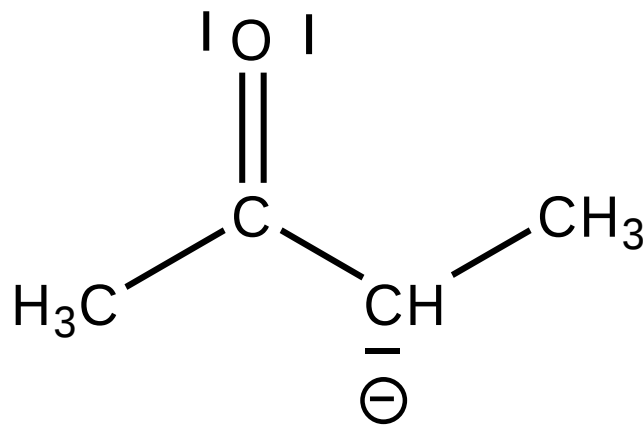


π δεσμός μεταξύ δύο ατόμων διαφορετικής ηλεκτραρνητικότητας ($\text{C}=\text{O}$)



Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

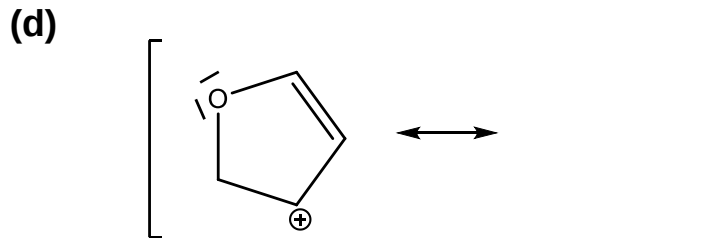
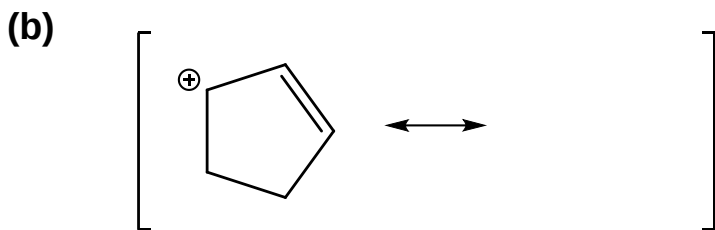
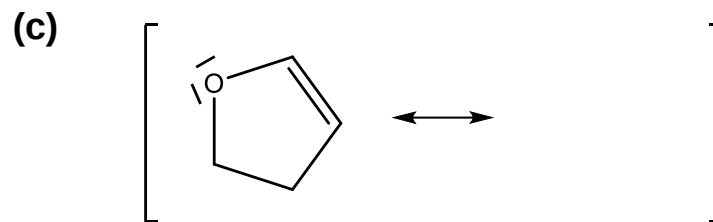
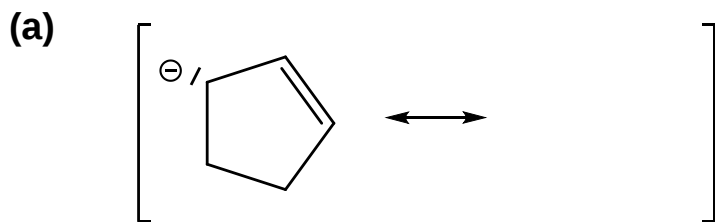
Ανιόντα καρβονυλικών ενώσεων



Συντονισμένη
μετακίνηση e⁻

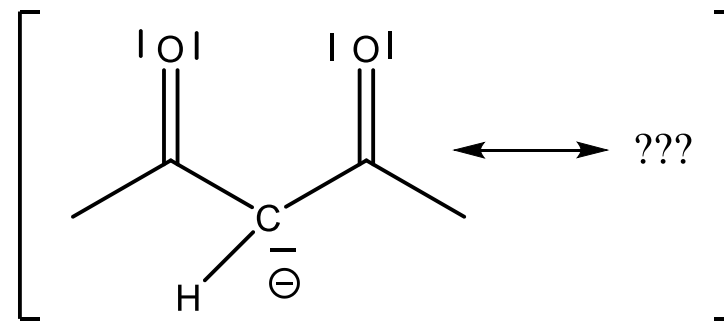
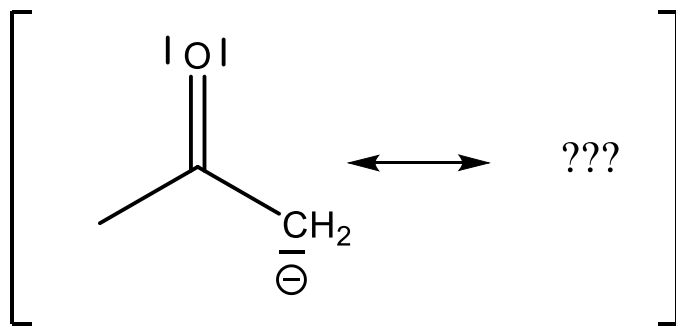
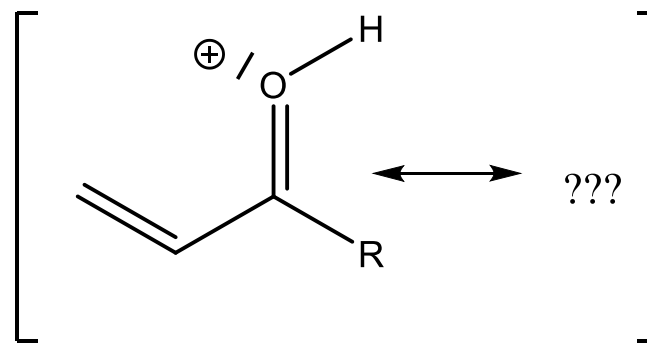
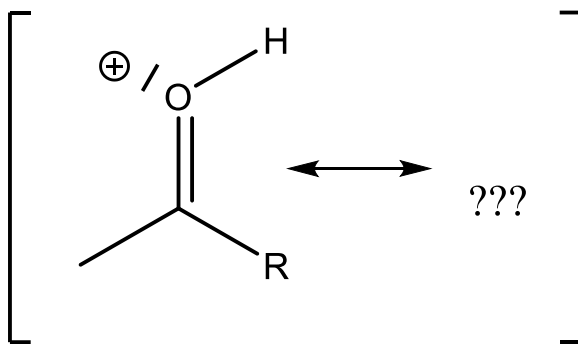
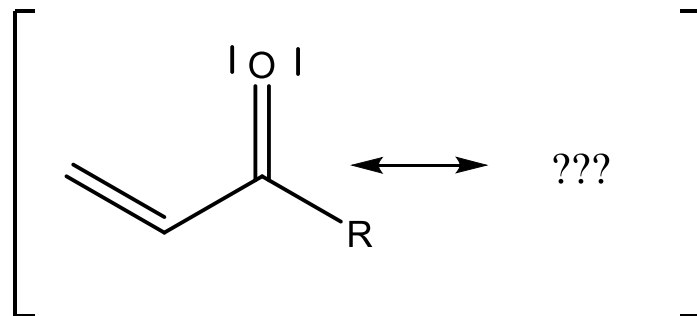
Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Άσκηση 1.6: Συμπληρώστε τις μεσομερείς δομές ή δομές συντονισμού των παρακάτω ενώσεων. Υποδείξτε την κύρια/δευτερεύουσα(ες) δομή συντονισμού για κάθε περίπτωση (όπου ισχύουν) και δικαιολογήστε την απάντησή σας.



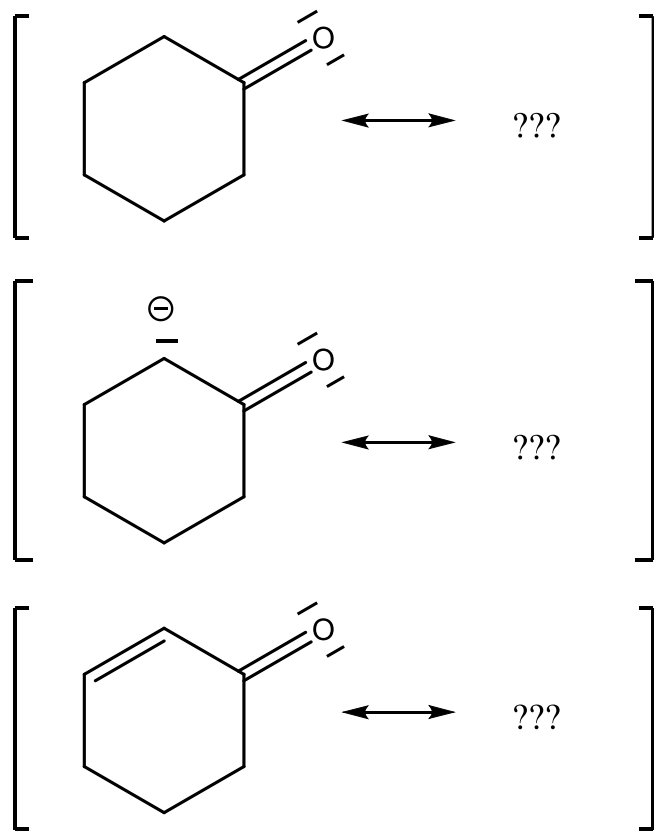
Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Άσκηση 1.7: Σχεδιάστε τις μεσομερείς δομές των παρακάτω ενώσεων.



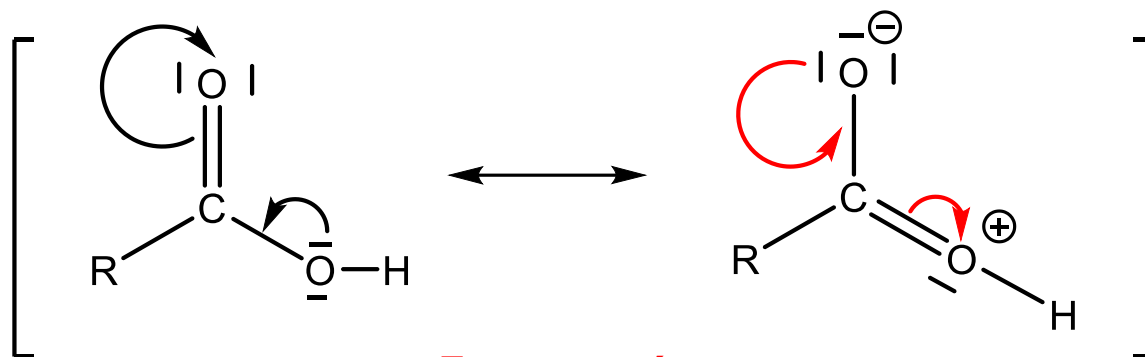
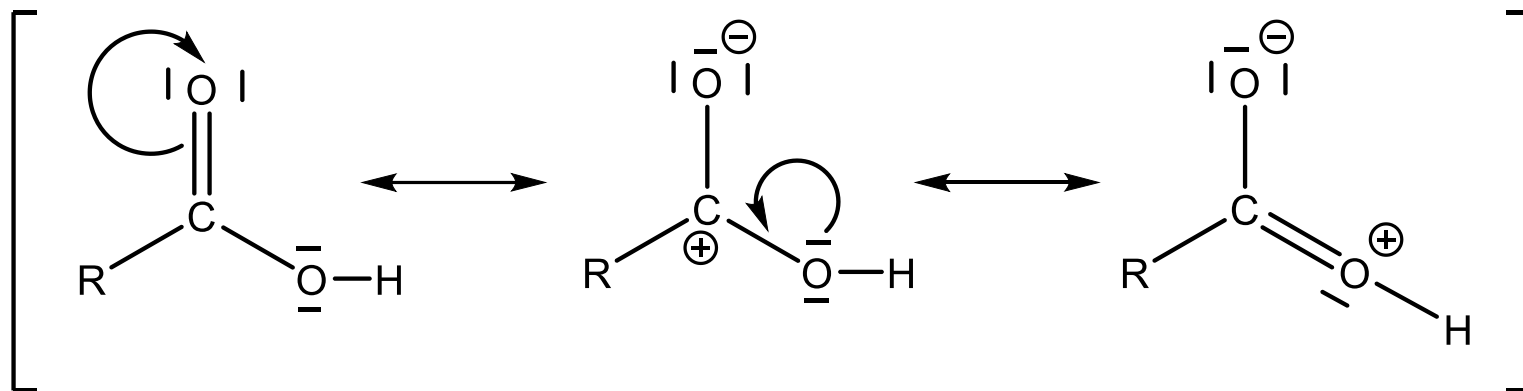
Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Άσκηση 1.8: Σχεδιάστε τις μεσομερείς δομές των παρακάτω ενώσεων. Υποδείξτε εκείνες τις δομές που συμβάλλουν σε μεγαλύτερο βαθμό στο υβρίδιο συντονισμού, για τις περιπτώσεις στις οποίες είναι δυνατό. Δώστε μία εξήγηση για την επιλεγμένη σειρά συνεισφοράς των δομών (κύριες και δευτερεύουσες) στο υβρίδιο συντονισμού.



Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

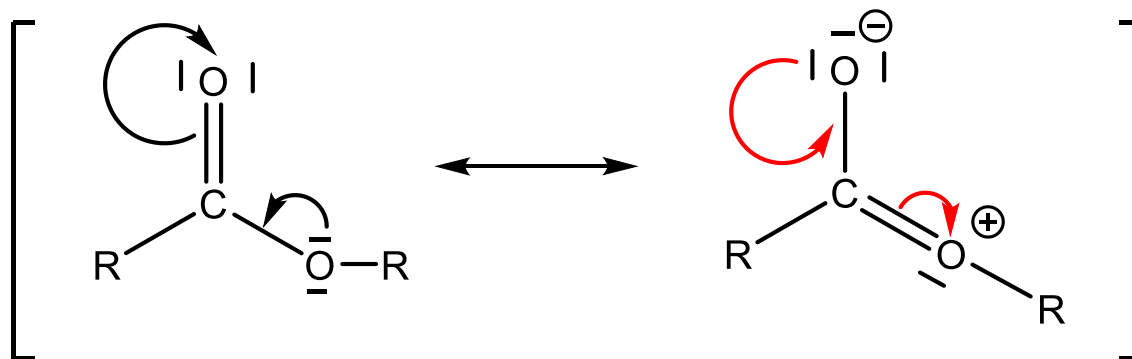
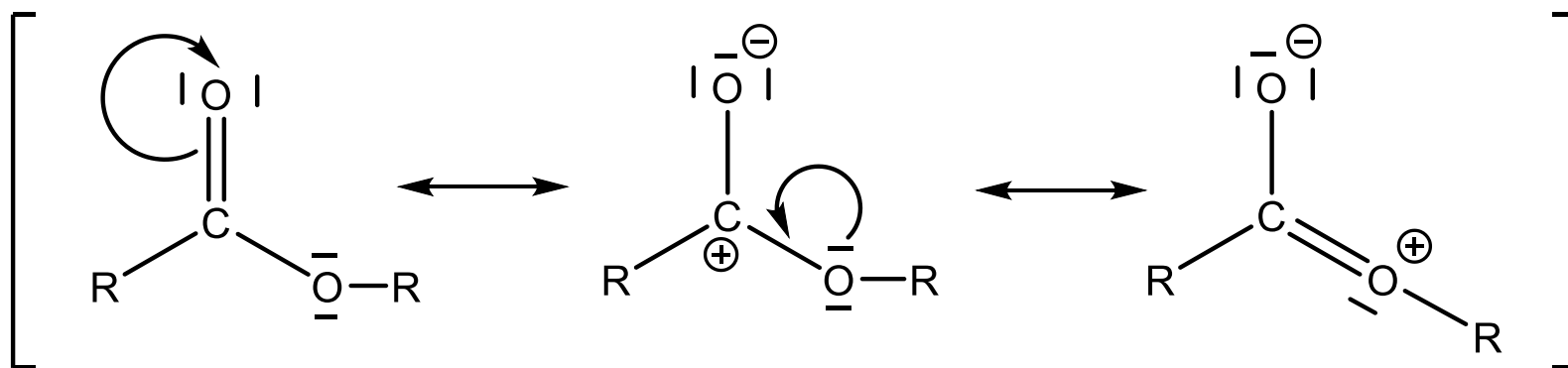
Καρβοξυλικά οξέα



Συντονισμένη
μετακίνηση e⁻

Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

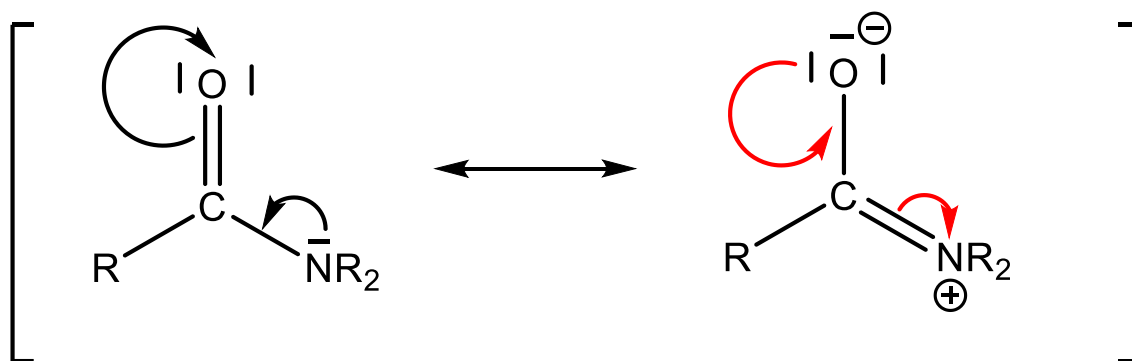
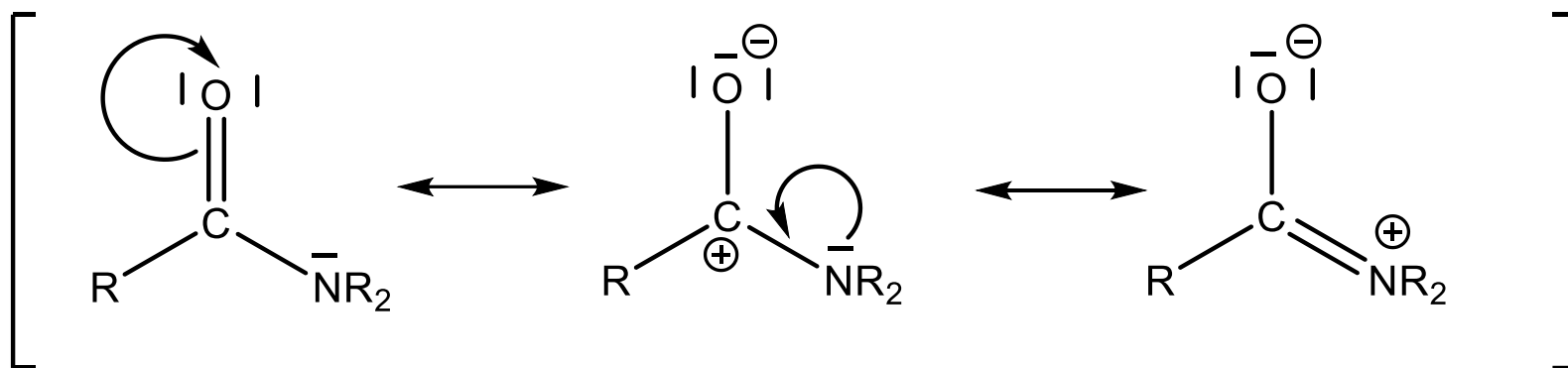
Εστέρες



Συντονισμένη
μετακίνηση e-

Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Αμίδια

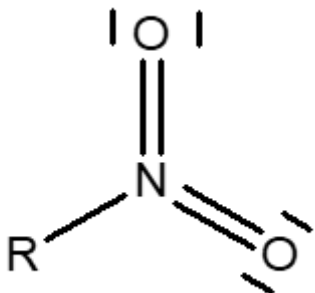


Συντονισμένη
μετακίνηση e^-

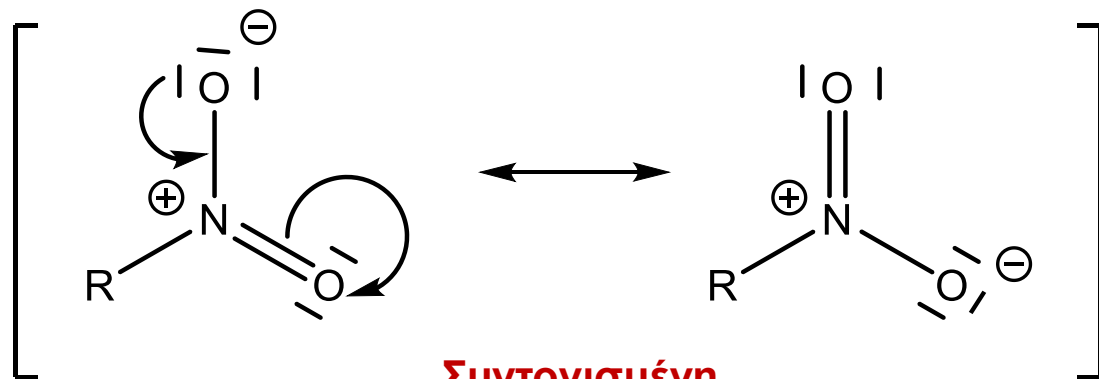
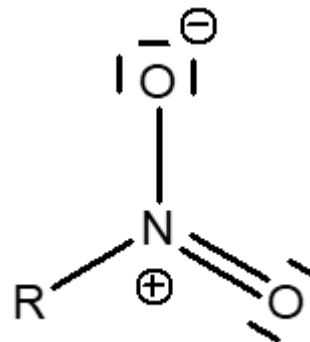
Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Νίτρο-ομάδες

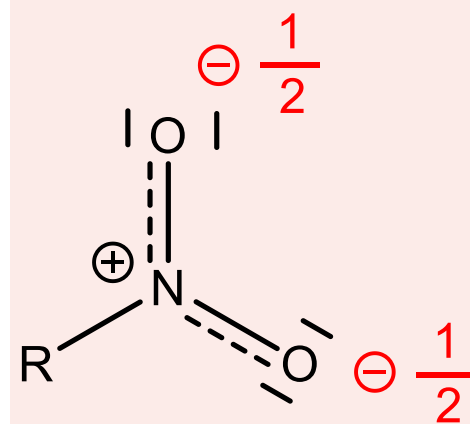
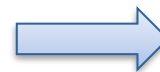
ΠΡΟΣΟΧΗ !!!
ΛΑΘΟΣ ΔΟΜΗ LEWIS
ΓΙΑΤΙ ???



ΣΩΣΤΗ ΔΟΜΗ LEWIS



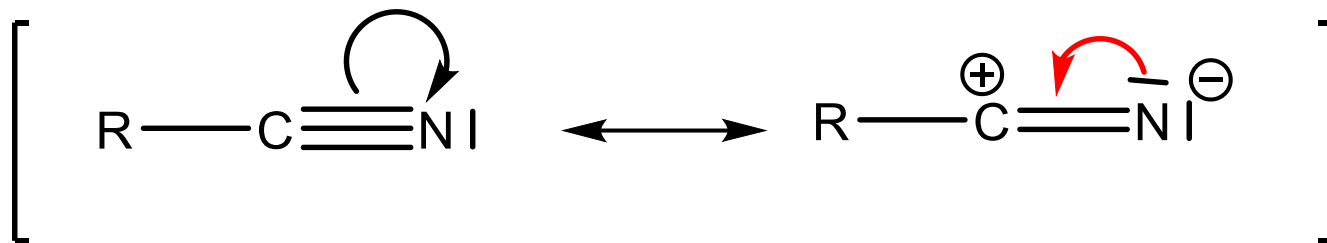
**Συντονισμένη
μετακίνηση e⁻**



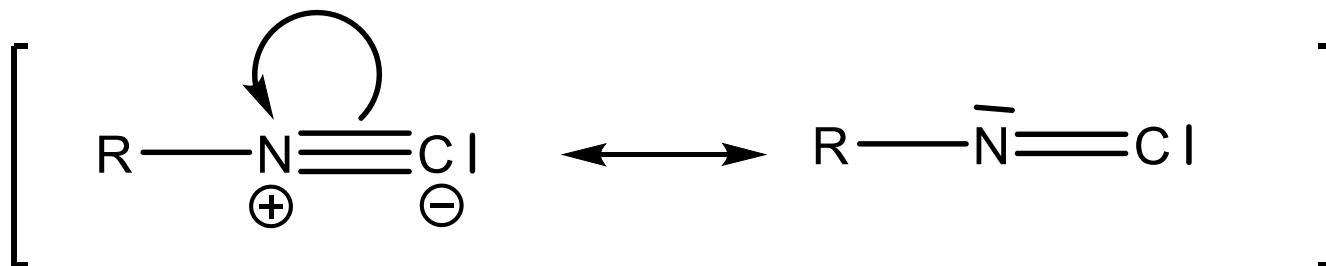
Υβρίδιο συντονισμού

Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Νιτρίλια



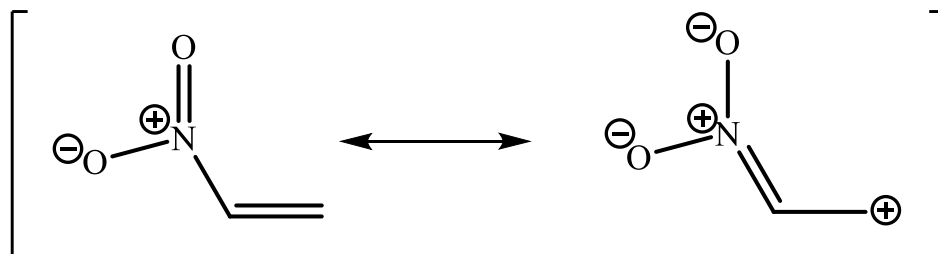
Ισοκυάνια



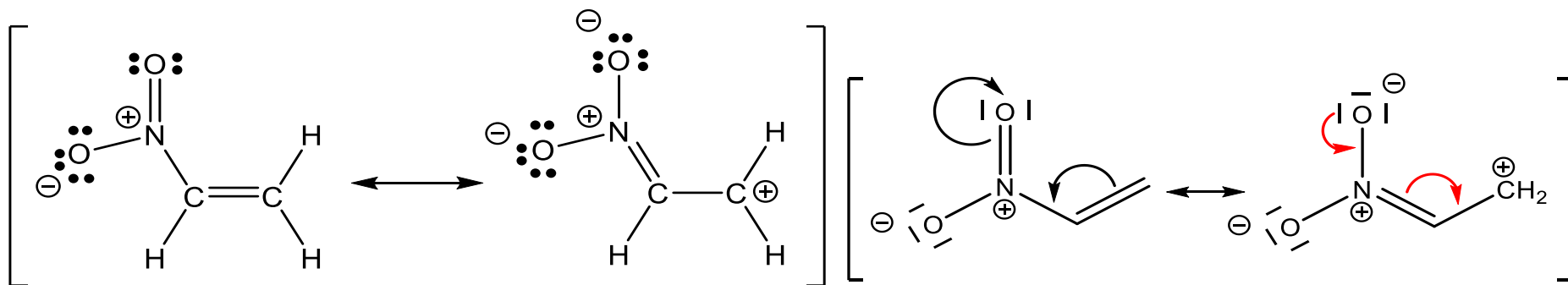
Η πιο πιθανή μετακίνηση των ηλεκτρονίων είναι προς το πιο ηλεκτραρνητικό άτομο

Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

Παράδειγμα 1.4: Ελέγξτε εάν οι παρακάτω δομές συντονισμού είναι σωστές.



Απάντηση



1. Έχουμε μετακίνηση e^- (όχι ατόμων) ? = **O.K.**
2. Επανελέγχος φορτίου κάθε ατόμου που συμμετέχει στη μεσομέρεια = **O.K.**
3. Το συνολικό φορτίο της ένωσης δεν μεταβάλλεται = **O.K.**
4. **Δείχνουμε την κίνηση των e^-**