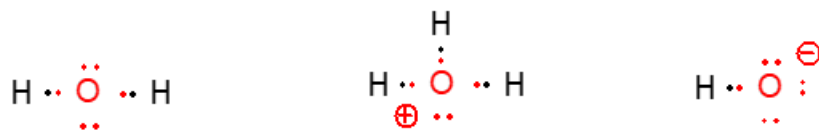
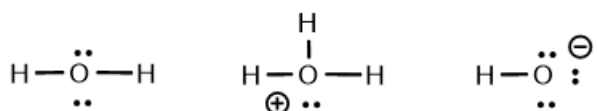
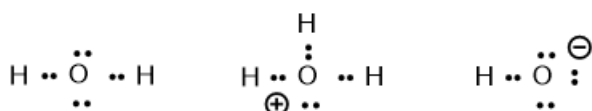


Κ1. ΧΗΜΙΚΕΣ ΔΟΜΕΣ

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ

Παραδείγματα σχεδιασμού δομών Lewis με εφαρμογή του κανόνα οκτάδας και εύρεση τυπικού φορτίου.

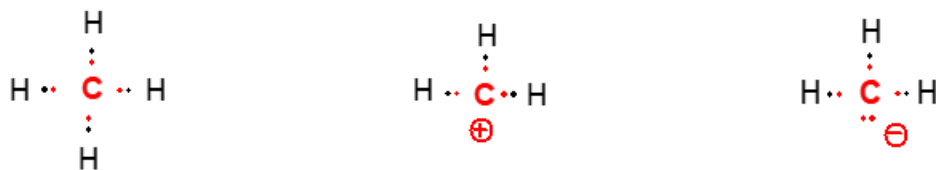
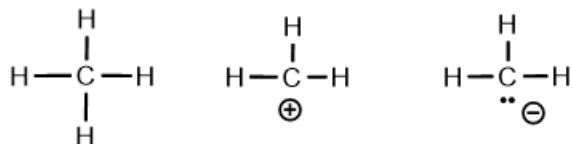
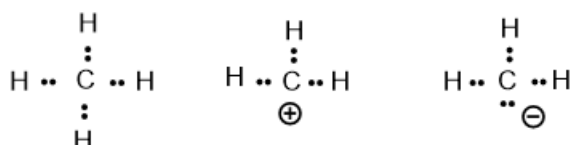
$$\text{Τυπικό φορτίο} = [n^{\circ} e^{-} \text{ σθένους}] - [n^{\circ} e^{-} \text{ αδεσμικά}] - [\frac{1}{2} n^{\circ} e^{-} \text{ δεσμικά}]$$



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

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

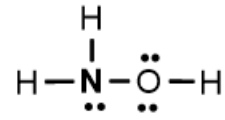
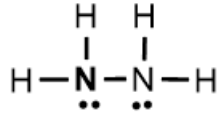
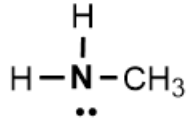
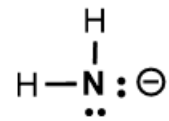
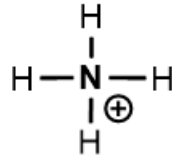
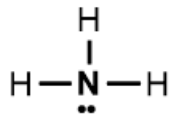
$$\text{T.}\Phi. (\text{O}) = 6 - 6 - \frac{1}{2} 2 = -1$$



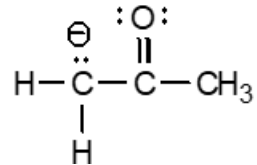
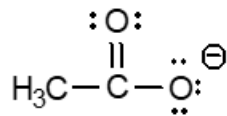
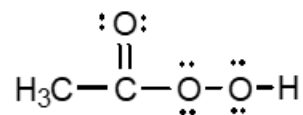
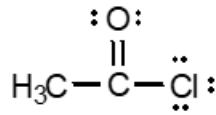
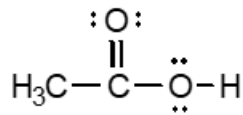
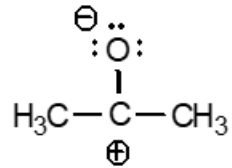
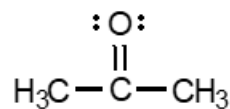
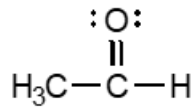
$$\text{T.}\Phi. (\text{C}) = 4 - 0 - \frac{1}{2} 8 = 0$$

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

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

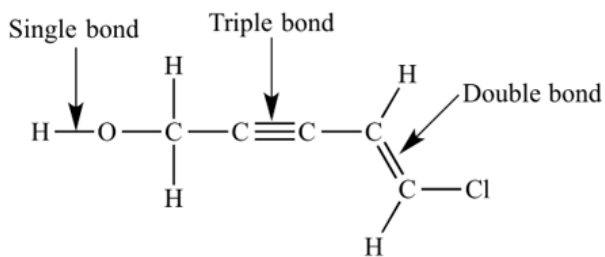


|



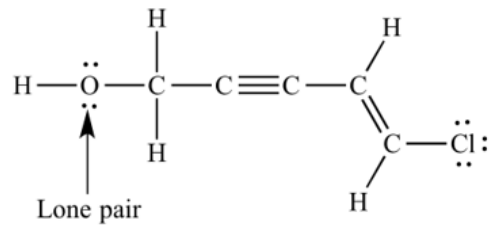
Τυπική δομή **Kekule'**

Δεν περιλαμβάνει μονήρη ζεύγη e⁻

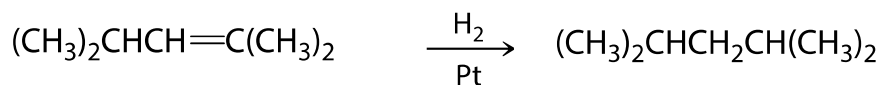


Αντίστοιχη δομή **Lewis**

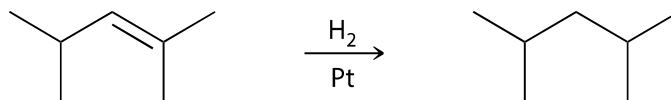
Τα μονήρη ζεύγη e⁻ παρουσιάζονται



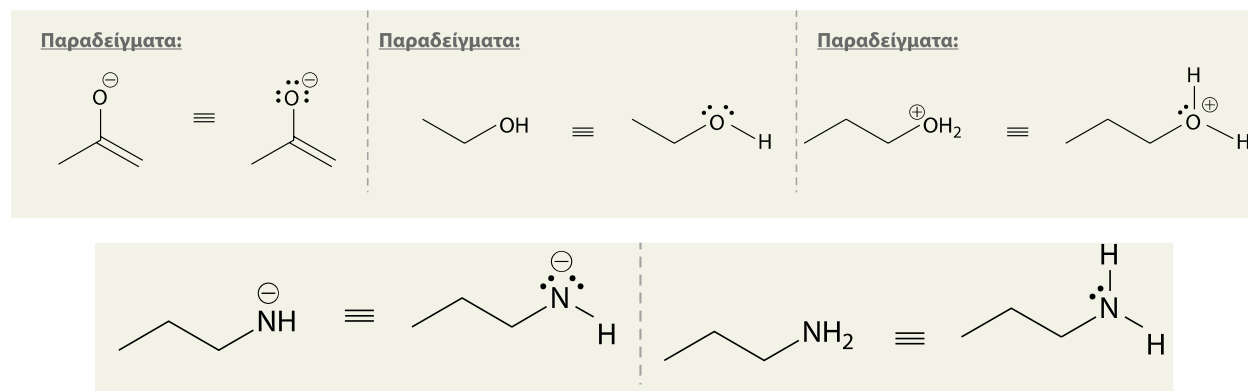
Παράδειγμα 1.1: Σχεδιάστε την παρακάτω αντίδραση χρησιμοποιώντας σκελετικές δομές.



Απάντηση =



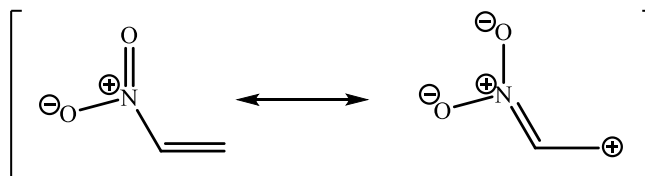
Παράδειγμα 1.2: Σχεδιάστε τις αντίστοιχες δομές όπου εμφανίζονται τα μονήρη e⁻ (δομές κατά Lewis), για κάθε παράδειγμα.



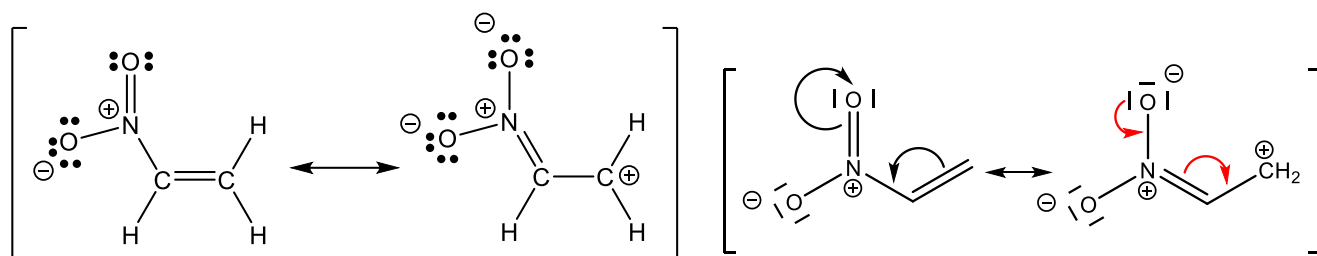
ΕΠΑΓΩΓΙΚΟ ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ

ΜΕΣΟΜΕΡΕΙΣ ΔΟΜΕΣ / ΔΟΜΕΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΥ

Παράδειγμα 1.3: Ελέγξτε εάν οι παρακάτω δομές συντονισμού είναι σωστές.



Απάντηση =

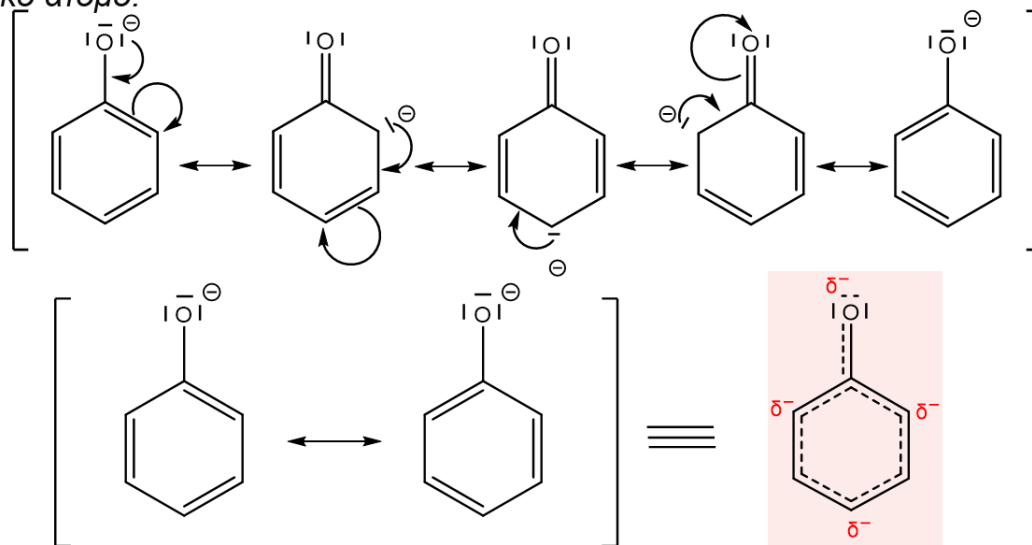


1. Έχουμε μετακίνηση e^- (όχι ατόμων) ? = **O.K.**
2. Επανελέγχος φορτίου κάθε ατόμου που συμμετέχει στη μεσομέρεια = **O.K.**
3. Το συνολικό φορτίο της ένωσης δεν μεταβάλλεται = **O.K.**
4. **Δείχνουμε την κίνηση των e^-**

ΜΟΝΟ-ΥΠΟΚΑΤΑΣΤΗΜΕΝΩΝ ΒΕΝΖΟΛΙΩΝ

Φαινοξείδιο

Παρατήρηση: Η O^- ομάδα ωθεί ένα ελεύθερο ζεύγος e^- της προς τον βενζολικό δακτύλιο (είναι **δότης e^- με μεσομέρεια**). Η μετακίνηση γίνεται από άτομο (ελεύθερο ζεύγος e^-) σε γειτονικό δεσμό και από το γειτονικό διπλό δεσμό στο γειτονικό άτομο.



Υβρίδιο συντονισμού

Μεσομερείς Δομές ή Δομές Συντονισμού

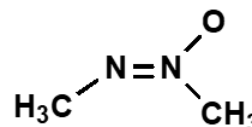
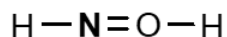
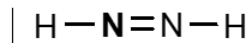
Κύρια Δομή Συντονισμού

- ✓ 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 φορτίου.

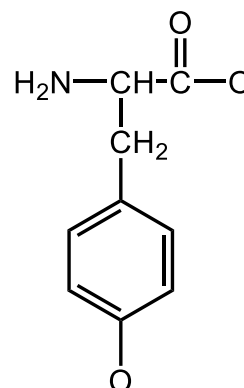
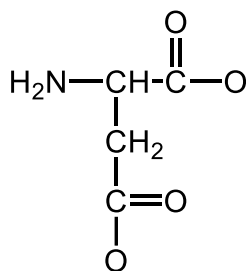
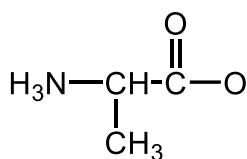
Η κύρια δομή «αντιπροσωπεύει καλύτερα την αληθινή δομή», επομένως συμβάλλει περισσότερο στο υβρίδιο συντονισμού.

ΑΣΚΗΣΕΙΣ

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



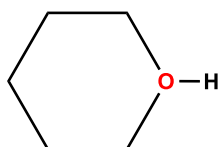
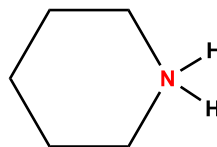
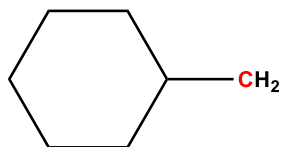
Άσκηση 1.2: Τα αμινοξέα είναι σημαντικές οργανικές ενώσεις των οποίων η χημική δραστηριότητα αλλά και οι ιδιότητές τους γενικότερα εξαρτάται και από τη χημική μορφή των ομάδων τους. Σημειώστε τα μη δεσμικά ηλεκτρόνια και τα τυπικά φορτία που λείπουν στις χαρακτηριστικές ομάδες των παρακάτω αμινοξέων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



Άσκηση 1.3: Παρατηρήστε τις παρακάτω σκελετικές δομές.

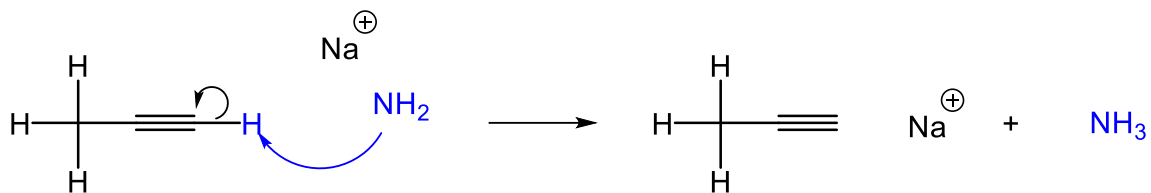
(a) Υποδείξτε εάν και πού λείπουν e⁻ ώστε να έχετε πλήρεις δομές Lewis.

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

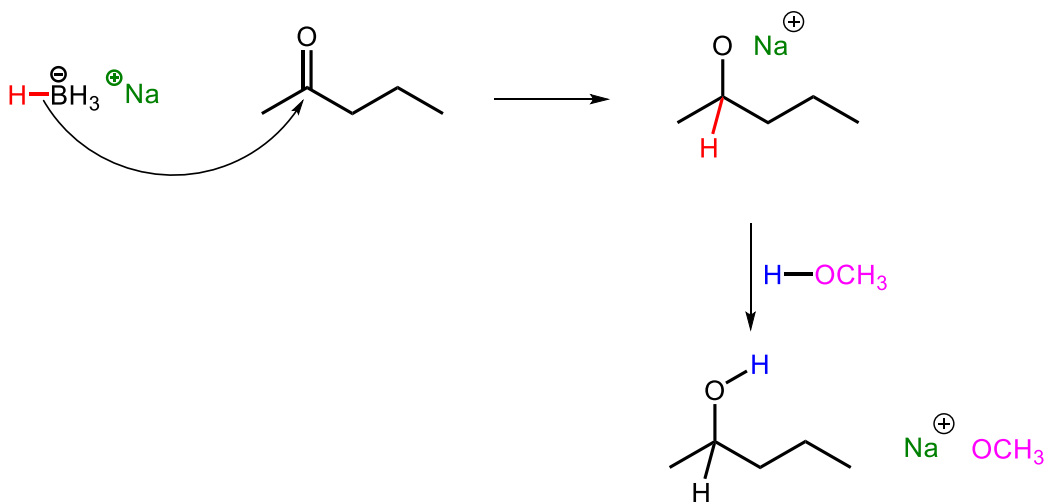


Άσκηση 1.4: Σημειώστε τα μη δεσμικά ηλεκτρόνια και τα φορτία που λείπουν σε κάθε στάδιο της παρακάτω αντίδρασης, ώστε να είναι πλήρεις οι δομές Lewis.

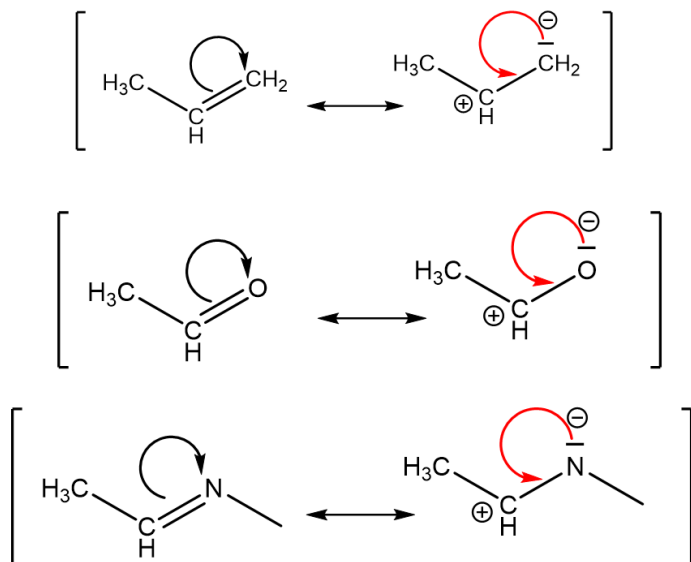
(a)



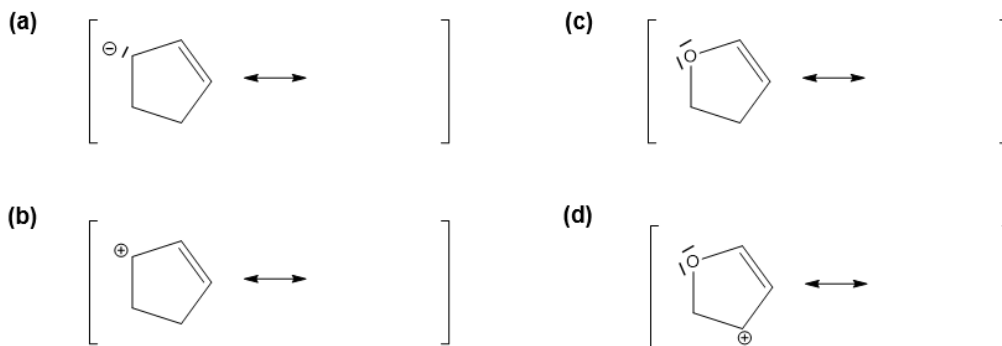
(b)



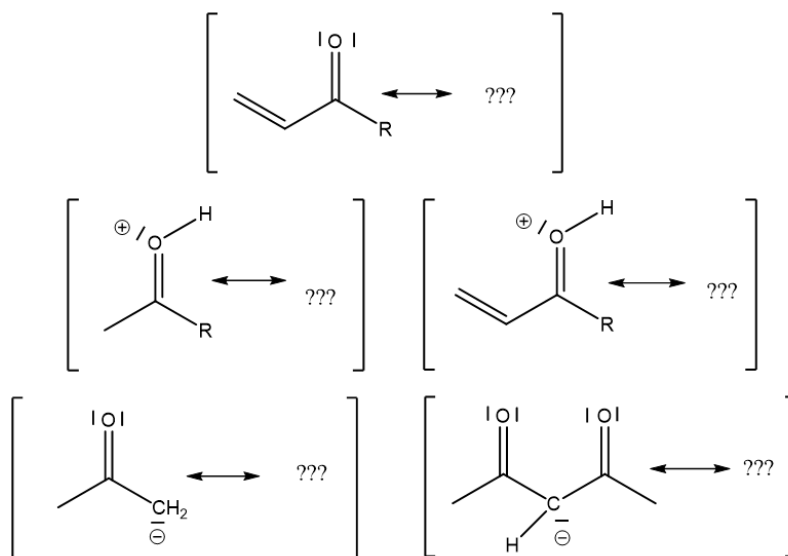
Άσκηση 1.5: Κατατάξτε τις παρακάτω μετακινήσεις e^- με βάση την ευκολία με την οποία γίνονται. Εξηγήστε τη σειρά κατάταξης.



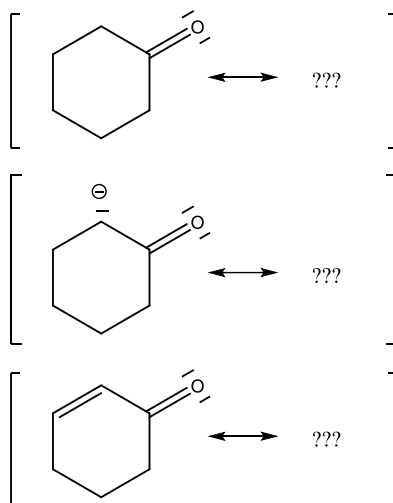
Άσκηση 1.6: Συμπληρώστε τις μεσομερείς δομές ή δομές συντονισμού των παρακάτω ενώσεων. Υποδείξτε την κύρια/δευτερεύουσα(ες) δομή συντονισμού για κάθε περίπτωση (όπου ισχύουν) και δικαιολογήστε την απάντησή σας.



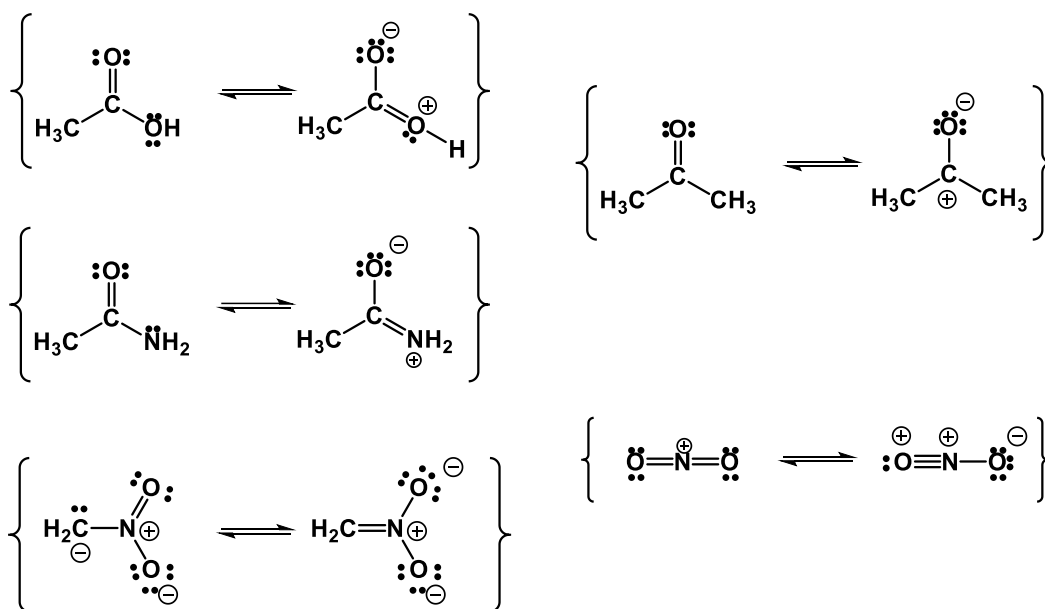
Άσκηση 1.7: Σχεδιάστε τις μεσομερείς δομές των παρακάτω ενώσεων.



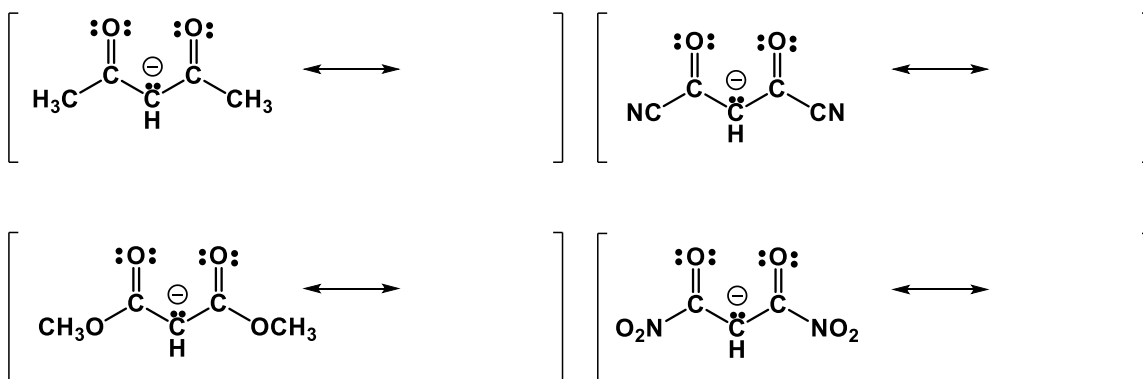
Άσκηση 1.8: Σχεδιάστε τις μεσομερείς δομές των παρακάτω ενώσεων. Υποδείξτε εκείνες τις δομές που συμβάλλουν σε μεγαλύτερο βαθμό στο υβρίδιο συντονισμού, για τις περιπτώσεις στις οποίες είναι δυνατό. Δώστε μια εξήγηση για την επιλεγμένη σειρά συνεισφοράς των δομών (κύριες και δευτερεύουσες) στο υβρίδιο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



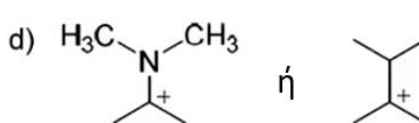
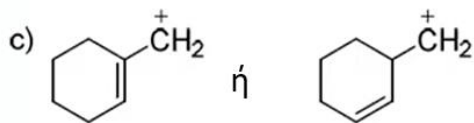
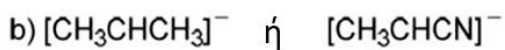
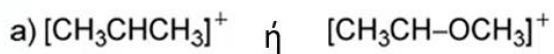
Άσκηση 1.9: Υποδείξτε την κίνηση των e⁻ στις παρακάτω δομές.



Άσκηση 1.10: Υποδείξτε την κίνηση των e⁻ στις παρακάτω δομές και σχεδιάστε την αντίστοιχες δομές Lewis.



Άσκηση 1.11: Για καθένα από τα ακόλουθα ζεύγη δομών, προσδιορίστε ποια είναι η πιο σταθερή. Σχεδιάστε τις αντίστοιχες δομές Lewis και χρησιμοποιήστε πιθανές δομές συντονισμού για να εξηγήσετε τις απαντήσεις σας.

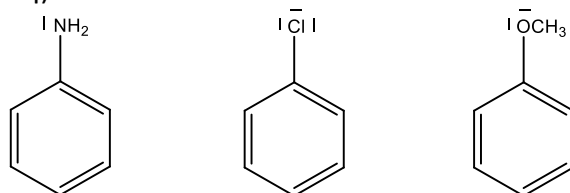


Άσκηση 1.12: Σχεδιάστε τις μεσομερείς δομές των παρακάτω ενώσεων.

(a) ανιλίνη (αμινοβενζόλιο ή φαινυλαμίνη)

(b) χλωροβενζόλιο

(c) μεθοξυβενζόλιο (ανισόλη)



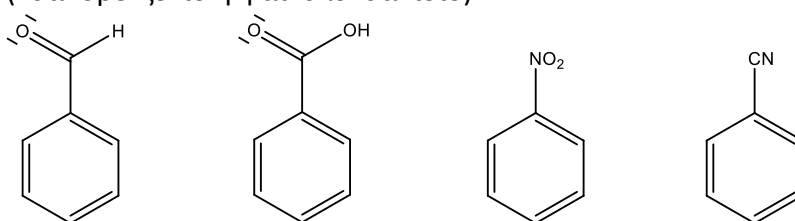
Άσκηση 1.13: Σχεδιάστε τις μεσομερείς δομές των παρακάτω ενώσεων.

(a) βενζαλδεΐδη

(b) βενζοϊκό οξύ

(c) νιτροβενζόλιο

(d) βενζονιτρίλιο (κυανοβενζένιο ή φαινυλοκυανίδιο)



Άσκηση 1.14: Υποδείξτε τον υβριδισμό που παρουσιάζει κάθε από τα άτομα άνθρακα στις ακόλουθες δομές.

