

Δομή και Δραστικότητα στην Οργανική Χημεία

Μέρος Α΄

Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Πατρών

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

Ηλεκτρόνια, Δεσμοί και Μοριακές αναπαραστάσεις

ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

Η **θεωρία των μοριακών τροχιακών**, ΘΜΤ (*molecular orbital theory*, MOT), περιγράφει την **κατανομή των ηλεκτρονίων στα μοριακά τροχιακά** των μορίων με τον ίδιο τρόπο που περιγράφεται στα ατομικά τροχιακά των ατόμων.

Ένα **μοριακό τροχιακό** είναι η **περιοχή του χώρου στην οποία ένα ηλεκτρόνιο σθένους σε ένα μόριο είναι πιθανό να βρεθεί.**

Τα μοριακά τροχιακά προκύπτουν από **συνδυασμό κυματοσυναρτήσεων ατομικών τροχιακών.**

➤ Η μαθηματική διαδικασία συνδυασμού ατομικών τροχιακών για τη δημιουργία μοριακών τροχιακών ονομάζεται *γραμμικός συνδυασμός ατομικών τροχιακών* (*linear combination of atomic orbitals*, LCAO).

$$\Psi_{\text{Molécula}} = \Psi_A + \Psi_B + \dots + \Psi_n$$

➤ Ο αριθμός των μοριακών τροχιακών που δημιουργούνται είναι ίσος με τον αριθμό των ατομικών τροχιακών.

➤ Τα ατομικά τροχιακά συνδυάζονται μόνο εάν έχουν παρόμοιες ενέργειες και κατάλληλες συμμετρίες και διατάξεις.

Ας θυμηθούμε...

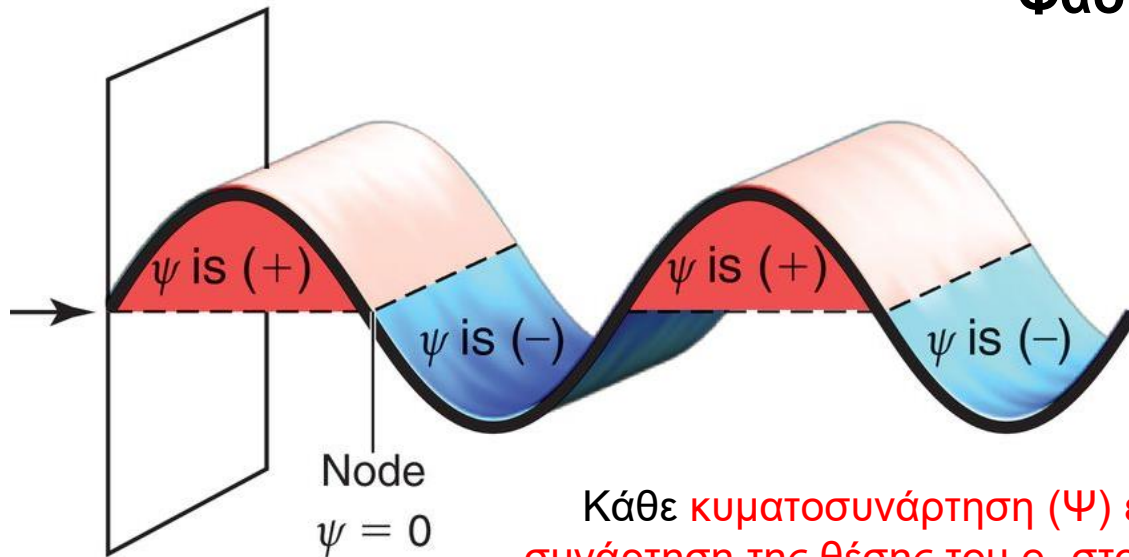
Το ατομικό τροχιακό προσδιορίζει **μια περιοχή του τρισδιάστατου χώρου στην οποία υπάρχει πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο ενός ατόμου. Κάθε ηλεκτρόνιο ενός ατόμου βρίσκεται σε ένα ορισμένο τροχιακό.**

ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

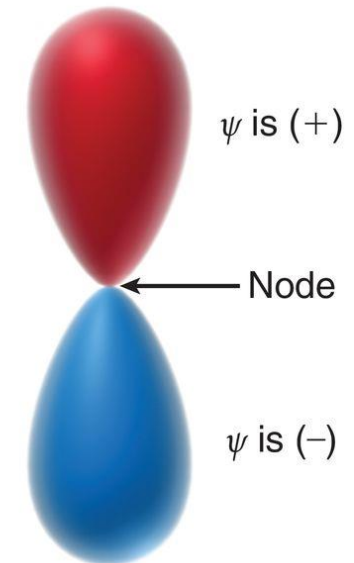
Η κβαντική θεωρία περιγράφει την κίνηση ενός e^- γύρω από τον πυρήνα ως κυματική εξίσωση, της οποίας η λύση ονομάζεται τροχιακό (ψ).

Όπως ένα κύμα σε μία λίμνη, η **κυματοσυνάρτηση** ενός ηλεκτρονίου μπορεί να έχει **θετική** και **αρνητική** τιμή, ή **μηδενική** (κόμβος).

Φάσεις Ατομικών Τροχιακών



Κάθε **κυματοσυνάρτηση (Ψ)** είναι **συνάρτηση της θέσης του e^- στο χώρο.**



- Παρόμοια στα ατομικά τροχιακά έχουμε $\psi(+)$, $\psi(-)$ και $\psi=0$ (κόμβος).
- Το **πρόσημο της κυματοσυνάρτησης** δεν έχει σχέση με το ηλεκτρονιακό φορτίο, αλλά **αναφέρεται στη φάση του κύματος.**

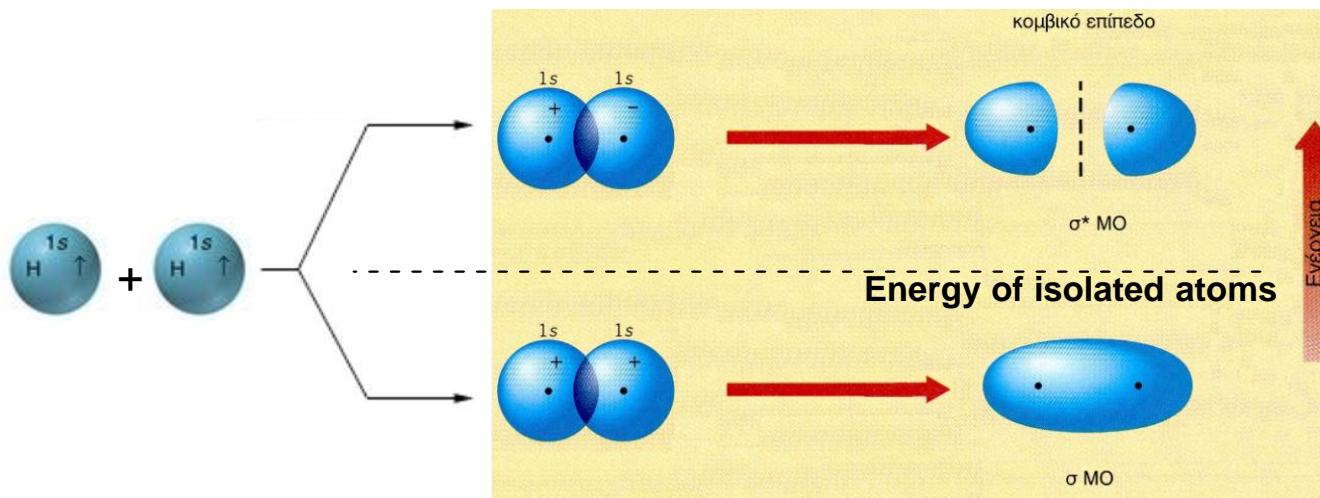
ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

Δεσμός σ

Σχηματισμός σ_s -δεσμικών τροχιακών \rightarrow
Δηλαδή σ δεσμού με αλληλοεπικάλυψη των s ατομικών τροχιακών

Υπάρχουν δύο τύποι μοριακών τροχιακών που μπορούν να σχηματιστούν από την επικάλυψη δύο ατομικών τροχιακών σε γειτονικά άτομα:

- Ο **συνδυασμός σε φάση (+/+, -/-)** παράγει τα χαμηλότερης ενέργειας μοριακά τροχιακά (**δεσμικά MT , σ_s**) στα οποία το μεγαλύτερο μέρος της ηλεκτρονιακής πυκνότητας βρίσκεται μεταξύ των πυρήνων.
- Ο **συνδυασμός εκτός φάσης (+/-)** παράγει τα υψηλότερης ενέργειας μοριακά τροχιακά (**αντιδεσμικά MT , σ_s^***) στα οποία το μεγαλύτερο μέρος της ηλεκτρονιακής πυκνότητας στα οποία υπάρχει κενό μεταξύ των πυρήνων.



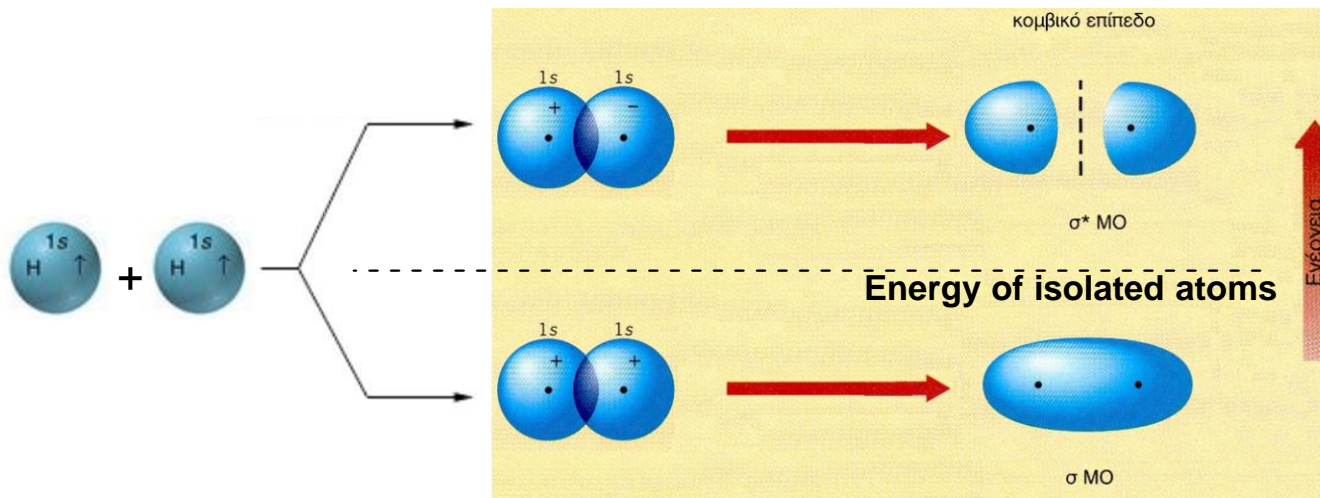
Το αντιδεσμικό MT (σ^*) χαρακτηρίζεται από το ότι έχει μια κομβική επιφάνεια ή κομβικό επίπεδο (nodal plane).

ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

Δεσμός σ

Τα ηλεκτρόνια στα σ_s (δεσμικά) μοριακά τροχιακά έλκονται και από τους δύο πυρήνες την ίδια στιγμή και είναι πιο σταθερά (χαμηλότερης ενέργειας) απ' ό,τι εάν ήταν ως ελεύθερα άτομα. Προσθέτοντας ηλεκτρόνια σε αυτά τα τροχιακά δημιουργείται μία δύναμη που συγκρατεί τους δύο πυρήνες μεταξύ τους, για το λόγω αυτό τα τροχιακά αυτά ονομάζονται **δεσμικά**.

Τα ηλεκτρόνια στα σ_s^* (αντιδεσμικά) μοριακά τροχιακά βρίσκονται μακριά από την περιοχή μεταξύ των δύο πυρήνων. Η ελκτική δύναμη μεταξύ των πυρήνων και των ηλεκτρονίων αυτών έχει σαν αποτέλεσμα να απωθούνται οι δύο πυρήνες και τα δύο αυτά μοριακά τροχιακά ονομάζονται **αντιδεσμικά**. Ο αστερίσκος υποδηλώνει το μοριακό τροχιακό με ηλεκτρονιακό κενό μεταξύ των πυρήνων, το οποίο είναι το υψηλότερης ενέργειας αντιδεσμικό μοριακό τροχιακό.



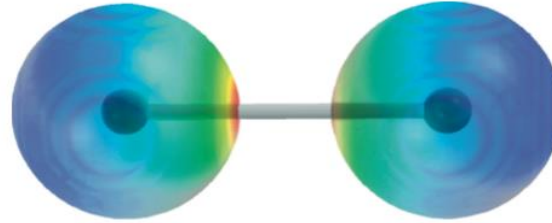
Το αντιδεσμικό MT (σ^*) χαρακτηρίζεται από το ότι έχει μια κομβική επιφάνεια ή κομβικό επίπεδο (nodal plane).

ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

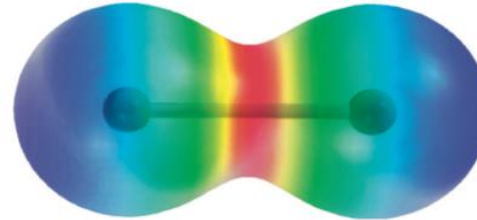
H_2 : αλληλοεπικάλυψη s-s

Δεσμός σ

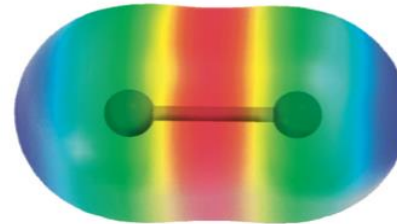
(α) Τα $1s$ τροχιακά δύο ατόμων υδρογόνου όταν αυτά βρίσκονται σε αρκετή απόσταση, ώστε να μην υπάρχουν αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους. Κάθε ηλεκτρόνιο δέχεται την έλξη του δικού του πυρήνα.



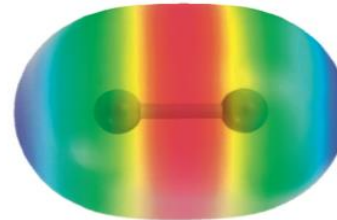
(β) Καθώς τα άτομα υδρογόνου πλησιάζουν το ένα το άλλο, τα $1s$ τροχιακά τους αρχίζουν να επικαλύπτονται και κάθε ηλεκτρόνιο αρχίζει να αισθάνεται την έλξη και του άλλου πρωτονίου.



(γ) Τα άτομα βρίσκονται αρκετά κοντά ώστε να αναπτύσσεται σημαντική αλληλοεπικάλυψη. Η αυξημένη ηλεκτρονιακή πυκνότητα ανάμεσα στους δύο πυρήνες είναι πλέον εμφανέστερη.



(δ) Ένα μόριο H_2 . Η απόσταση ανάμεσα στους δύο πυρήνες είναι 74 pm ($0,74 \text{ \AA}$). Τα δύο ατομικά $1s$ τροχιακά έχουν αντικατασταθεί από ένα νέο τροχιακό που περικλείει και τα δύο υδρογόνα και περιέχει και τα δύο ηλεκτρόνια. Η ηλεκτρονιακή πυκνότητα είναι μέγιστη στην περιοχή ανάμεσα στους δύο πυρήνες.

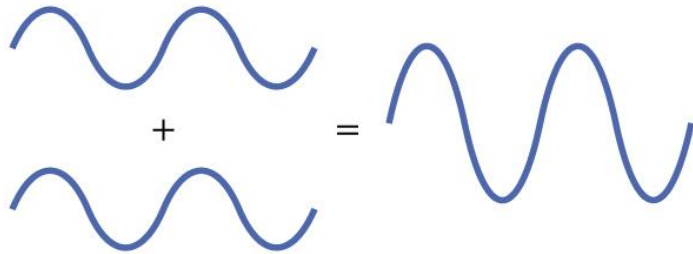


ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

H_2 : αλληλοεπικάλυψη s-s

Δεσμός σ

(α) Η πρόσθεση των 1s κυματοσυναρτήσεων δύο υδρογόνων δημιουργεί ένα δεσμικό μοριακό τροχιακό (σ) του H_2 . Στο τροχιακό αυτό υπάρχει μεγάλη πιθανότητα εύρεσης και των δύο ηλεκτρονίων ανάμεσα στους δύο πυρήνες.



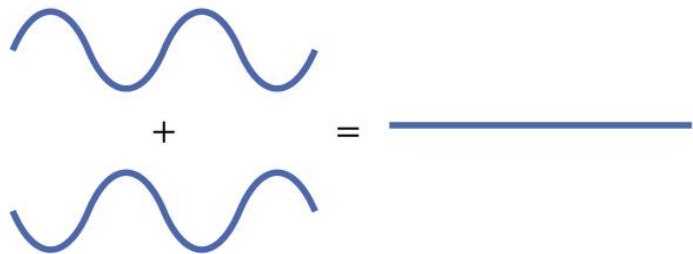
(a) **constructive interference**



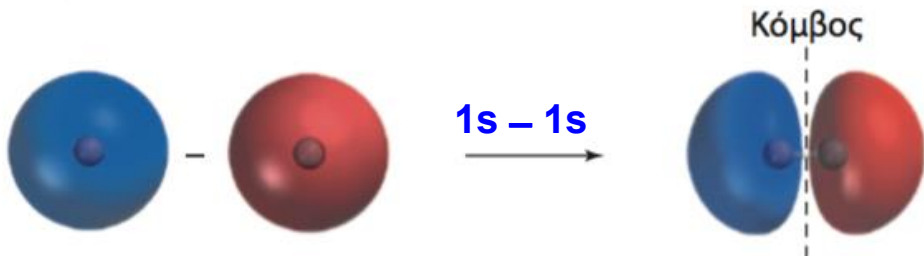
Πρόσθεση 1s κυματοσυναρτήσεων

σ τροχιακό (δεσμικό)

(β) Η αφαίρεση των 1s κυματοσυναρτήσεων δύο υδρογόνων δημιουργεί ένα αντιδεσμικό μοριακό τροχιακό (σ^*) του H_2 . Ανάμεσα στους δύο πυρήνες υπάρχει μια κομβική επιφάνεια όπου η πιθανότητα εύρεσης και των δύο ηλεκτρονίων είναι μηδέν.



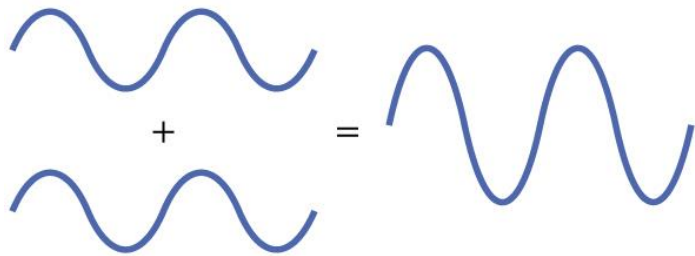
(b) **destructive interference**



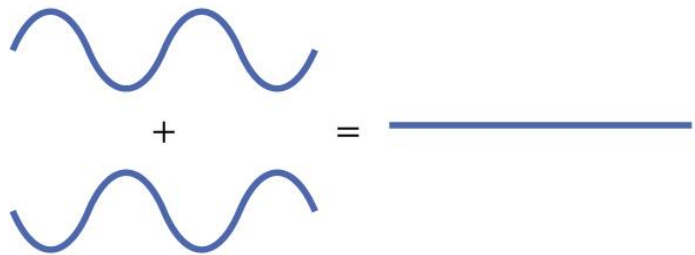
Αφαίρεση 1s κυματοσυναρτήσεων

σ^* τροχιακό (αντιδεσμικό)

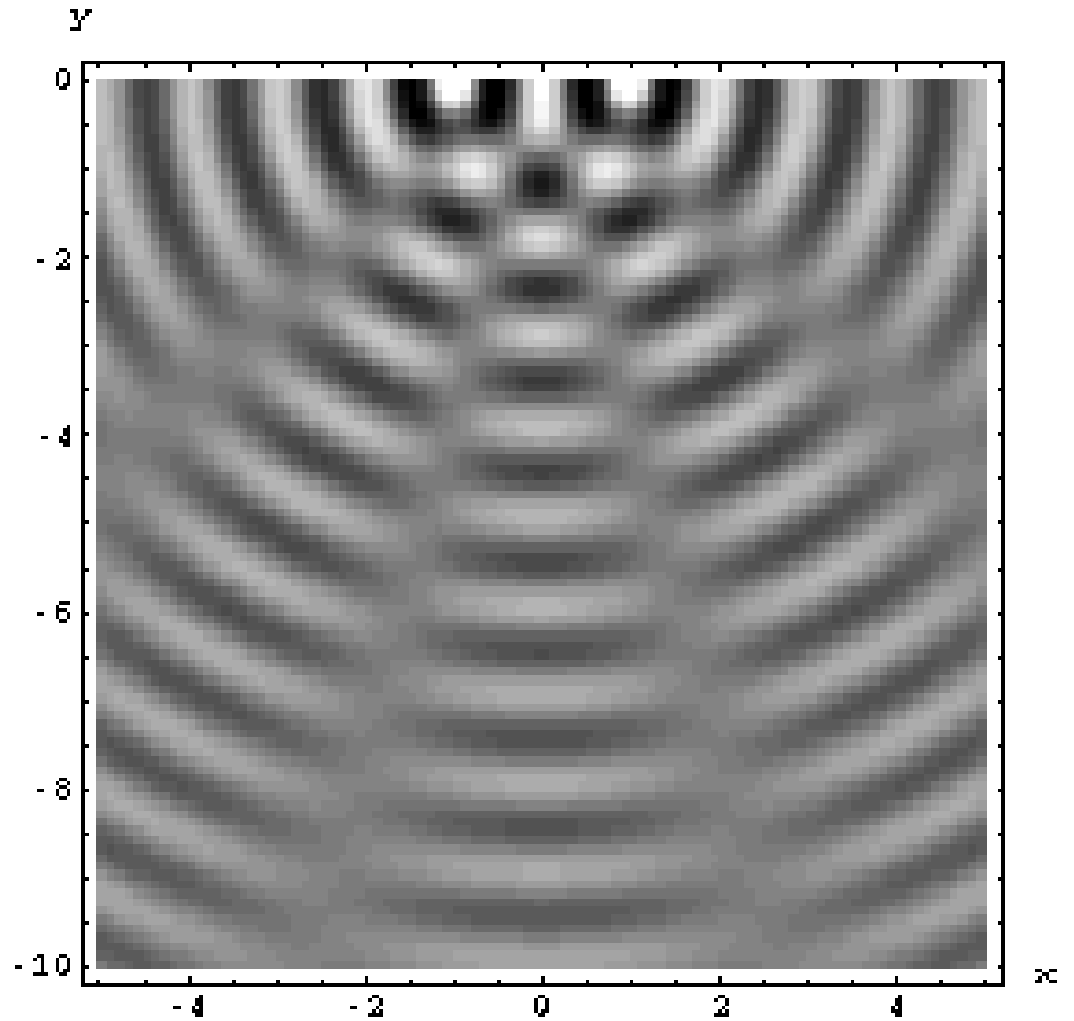
ΜΟΠΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ



(a) **constructive interference**



(b) **destructive interference**

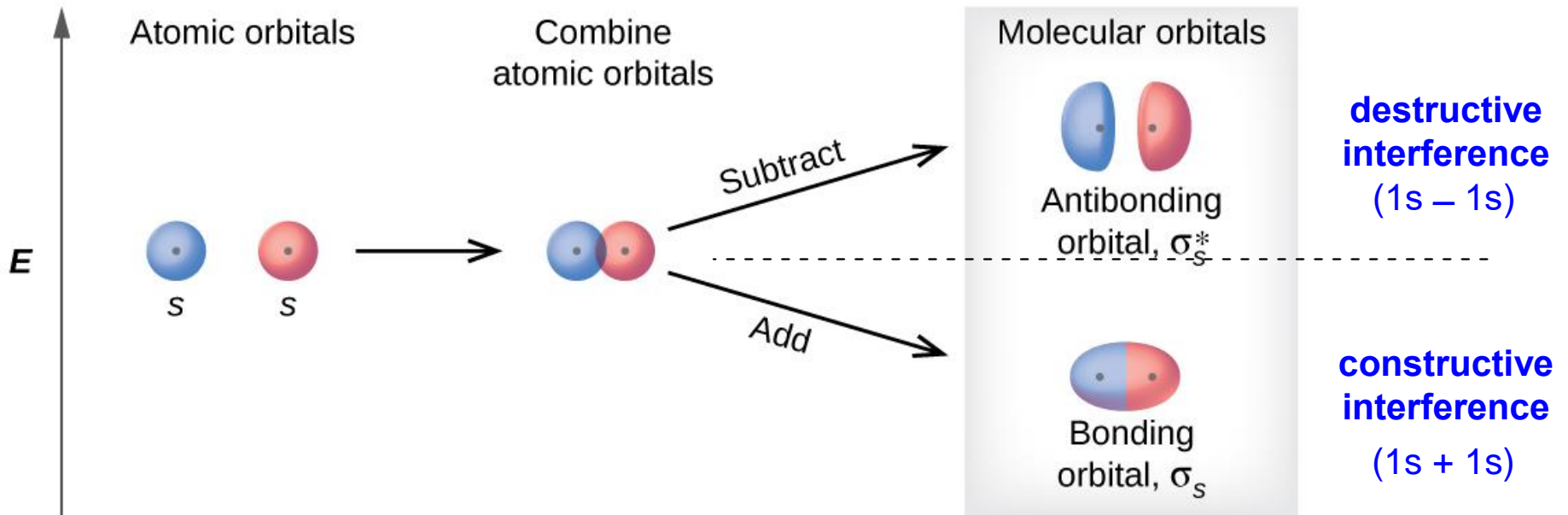


ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

H₂: αλληλοεπικάλυψη s-s

Δεσμός σ

Για να δείξουμε τη διαφορά στην ενεργειακή κατάσταση των μοριακών τροχιακών που σχηματίζονται αυτά τοποθετούνται ως εξής:

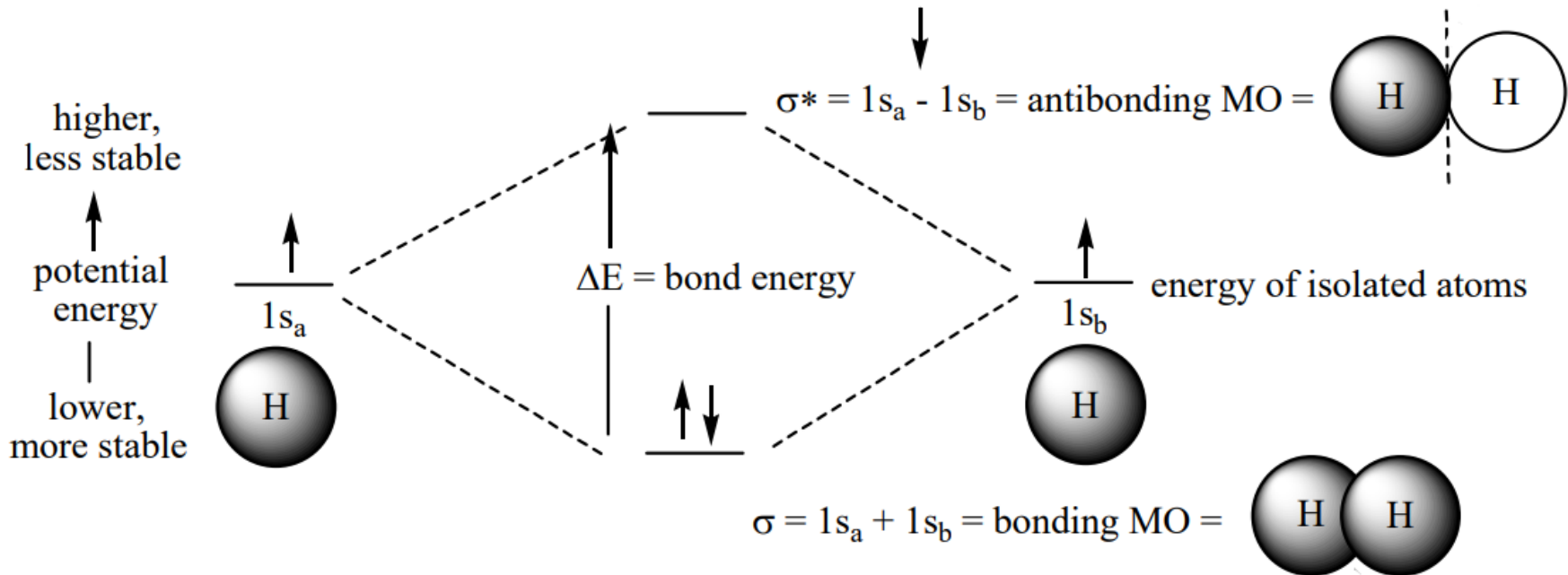


ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

H₂: αλληλοεπικάλυψη s-s

Δεσμός σ

LCAO = linear combination of atomic orbitals



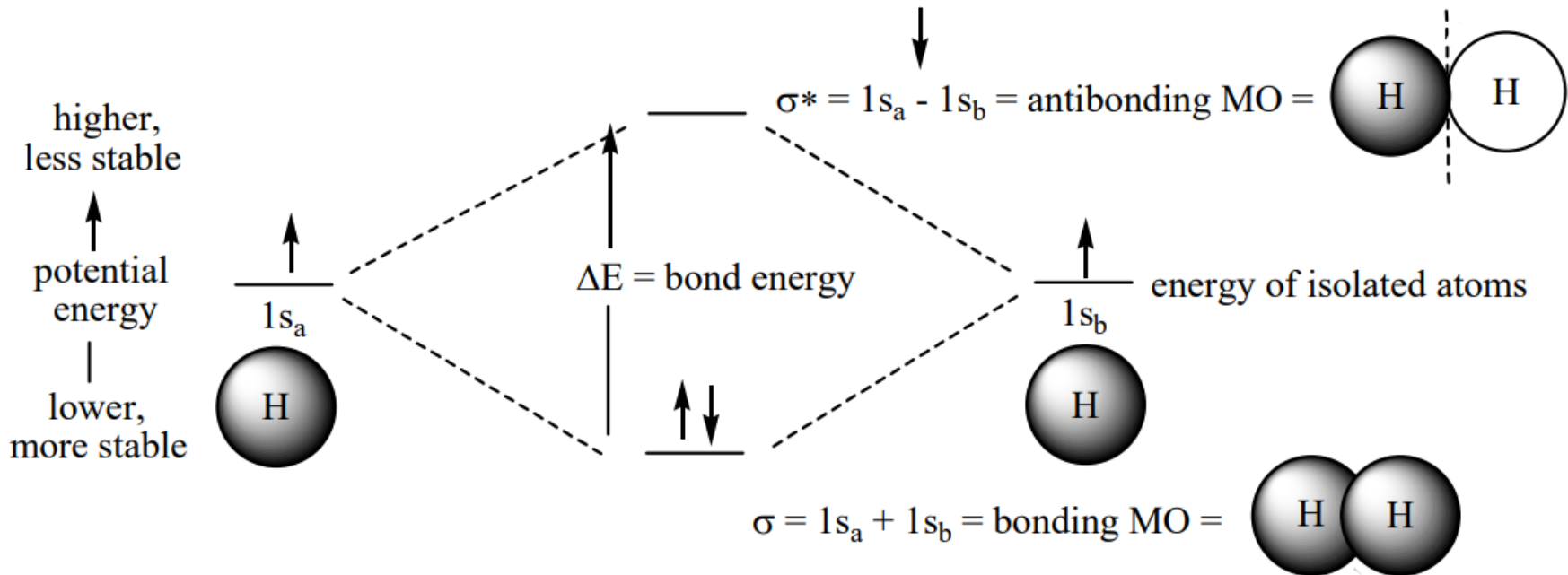
Τα ηλεκτρόνια συμπληρώνουν πρώτα τα χαμηλότερης ενέργειας δεσμικά μοριακά τροχικά (σ_s) και μετά τα υψηλότερης ενέργειας αντιδεσμικά μοριακά τροχιακά (σ^*_s), όπως συμπληρώνουν πρώτα τα χαμηλότερης ενέργειας ατομικά τροχιακά και στη συνέχεια τα υψηλότερης ενέργειας ατομικά τροχιακά.

ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

H₂: αλληλοεπικάλυψη s-s

Δεσμός σ

LCAO = linear combination of atomic orbitals



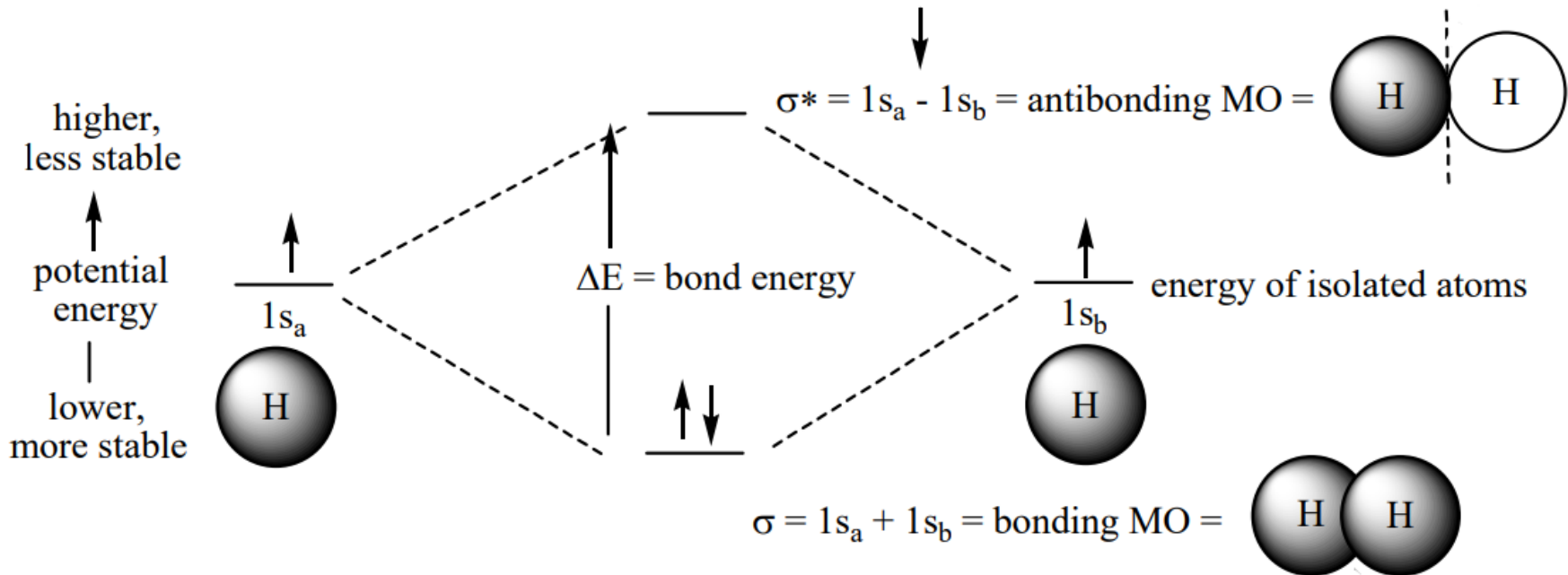
$$\text{bond order} = \frac{(\text{number of bonding electrons}) - (\text{number of antibonding electrons})}{2} = \text{amount of bonding}$$

ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

H₂: αλληλοεπικάλυψη s-s

Δεσμός σ

LCAO = linear combination of atomic orbitals



$$\text{bond order (H}_2 \text{ molecule)} = \frac{(2) - (0)}{2} = 1 \text{ bond}$$

n^o of e- in bonding MOs

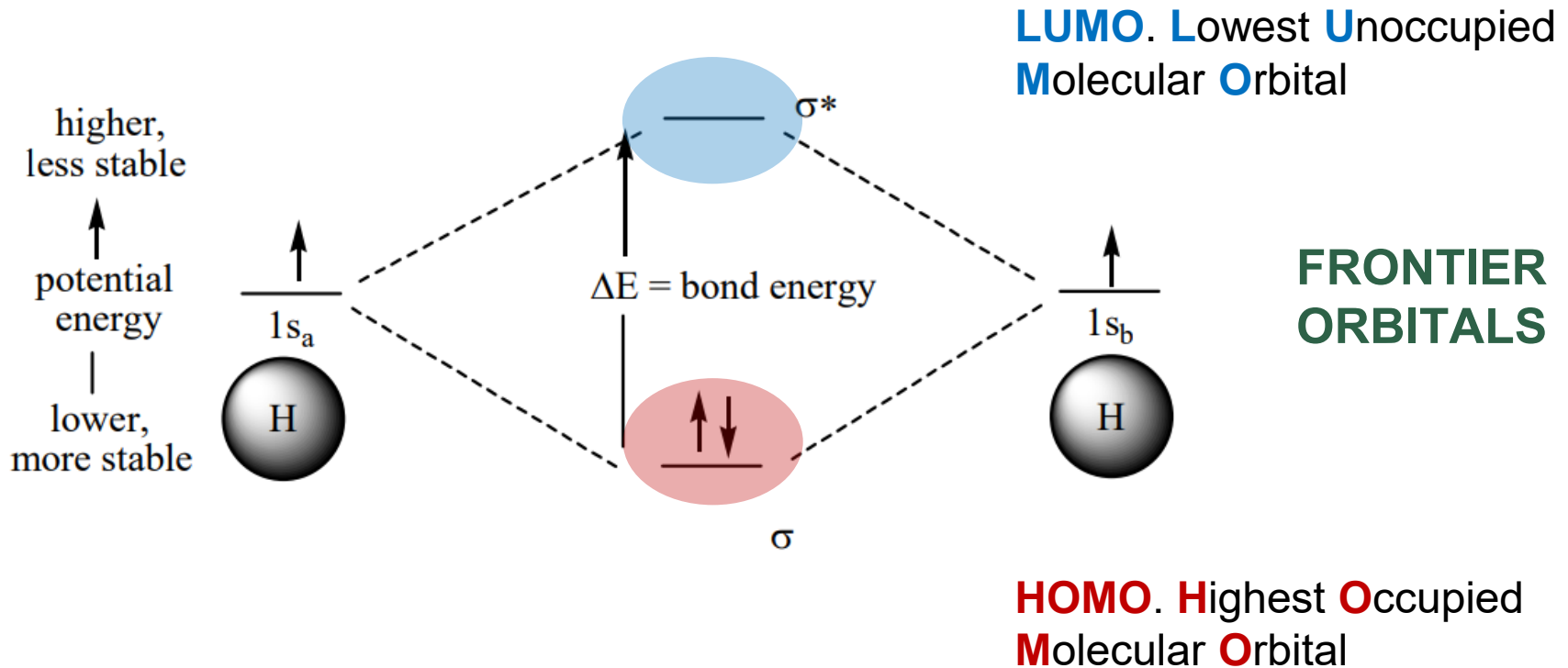
n^o of e- in antibonding MOs

There is a big energy advantage for a hydrogen molecule over two hydrogen atoms.

ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

H_2 : αλληλοεπικάλυψη s-s

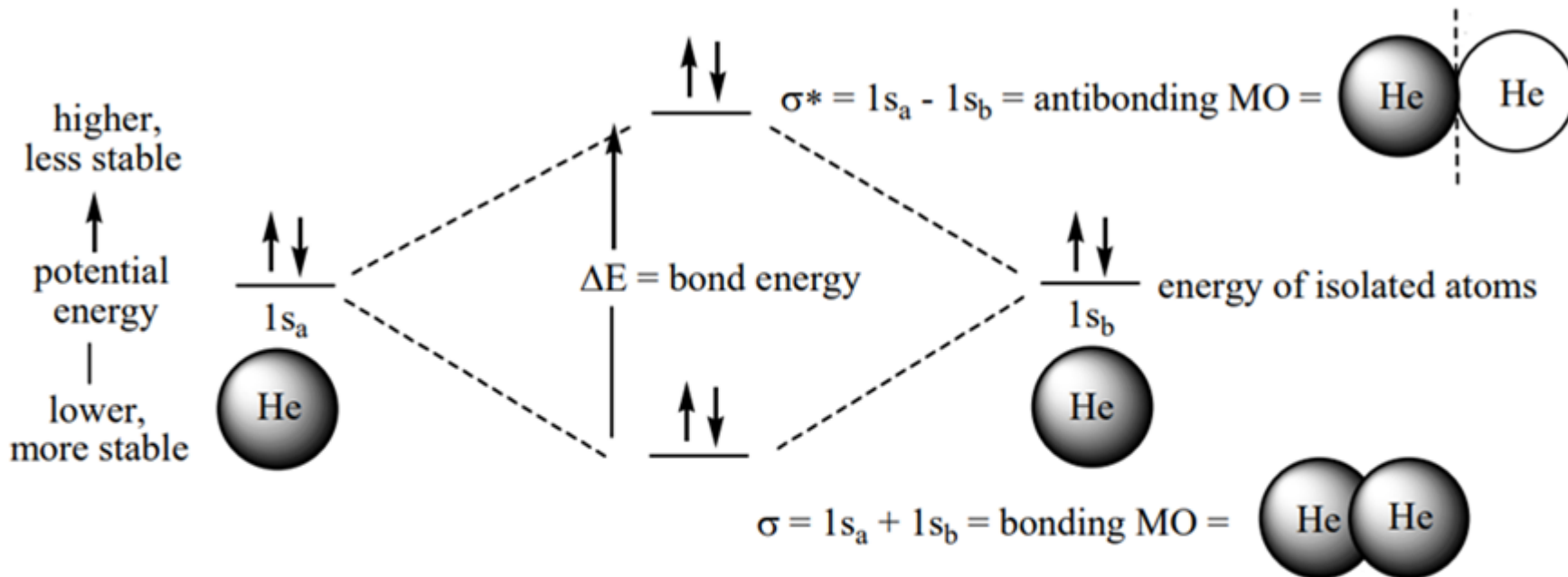
Δεσμός σ



ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

Δεσμός σ

He₂? υπάρχει?



$$\text{bond order (He}_2 \text{ molecule)} = \frac{(2) - (2)}{2} = 0 \text{ bond}$$

n^o of e- in bonding MOs

n^o of e- in antibonding MOs

There is no energy advantage for a helium molecule over two helium atoms.

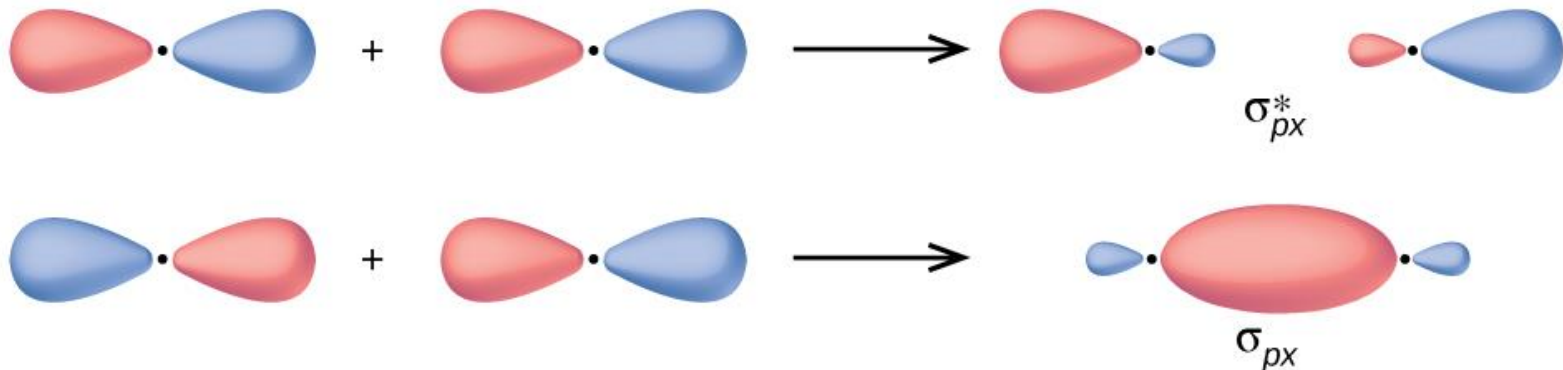
Η ΘΜΤ δεν προβλέπει σταθερό διατομικό μόριο (He₂).

ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

Δεσμός σ

Σχηματισμός σ_p -δεσμικών και σ_p^* -αντιδεσμικών τροχιακών \rightarrow
Δηλαδή σ δεσμού με αλληλοεπικάλυψη των p ατομικών τροχιακών

Ο συνδυασμός των κυματοσυναρτήσεων των δύο p ατομικών τροχιακών κατά μήκος του εσωτερικού πυρηνικού άξονα δημιουργεί δύο μοριακά τροχιακά σ_p and σ_p^* .



Συνεπώς, για τα άτομα που βρίσκονται κατά μήκος του x -άξονα (σε ένα Καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων), τα δύο p_x τροχιακά αλληλοεπικαλύπτονται σε ένα σ_{px} (δεσμικό) και ένα σ_{px}^* (αντιδεσμικό) μοριακό τροχιακό, αντίστοιχα. Ο αστερίσκος υποδηλώνει το μοριακό τροχιακό με ηλεκτρονικό κενό μεταξύ των πυρήνων, το οποίο είναι το υψηλότερης ενέργειας αντιδεσμικό μοριακό τροχιακό.

ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

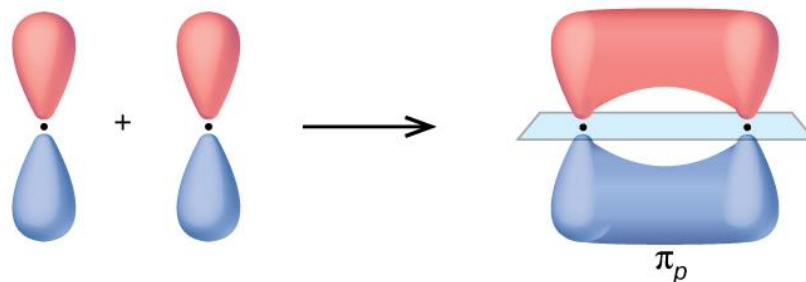
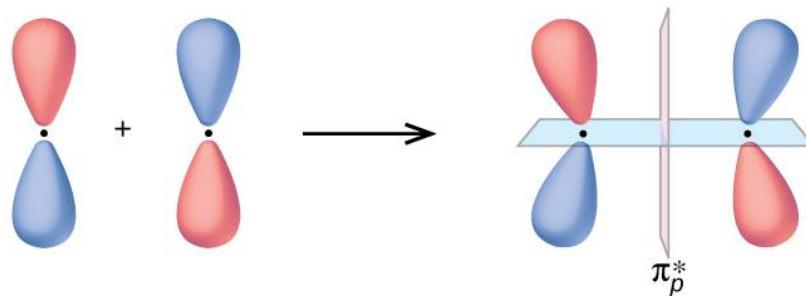
Δεσμός π

Σχηματισμός π_p -δεσμικών και π_p^* -αντιδεσμικών τροχιακών →
Δηλαδή σ δεσμού με αλληλοεπικάλυψη των p ατομικών τροχιακών

Η **πλευρική αλληλοεπικάλυψη** δύο p τροχιακών έχει ως αποτέλεσμα τον σχηματισμό δύο μοριακών τροχιακών π.

- Ο συνδυασμός των εκτός φάσης τροχιακών έχει ως αποτέλεσμα ένα αντιδεσμικό μοριακό τροχιακό με δύο κόμβους (**π_p^***).

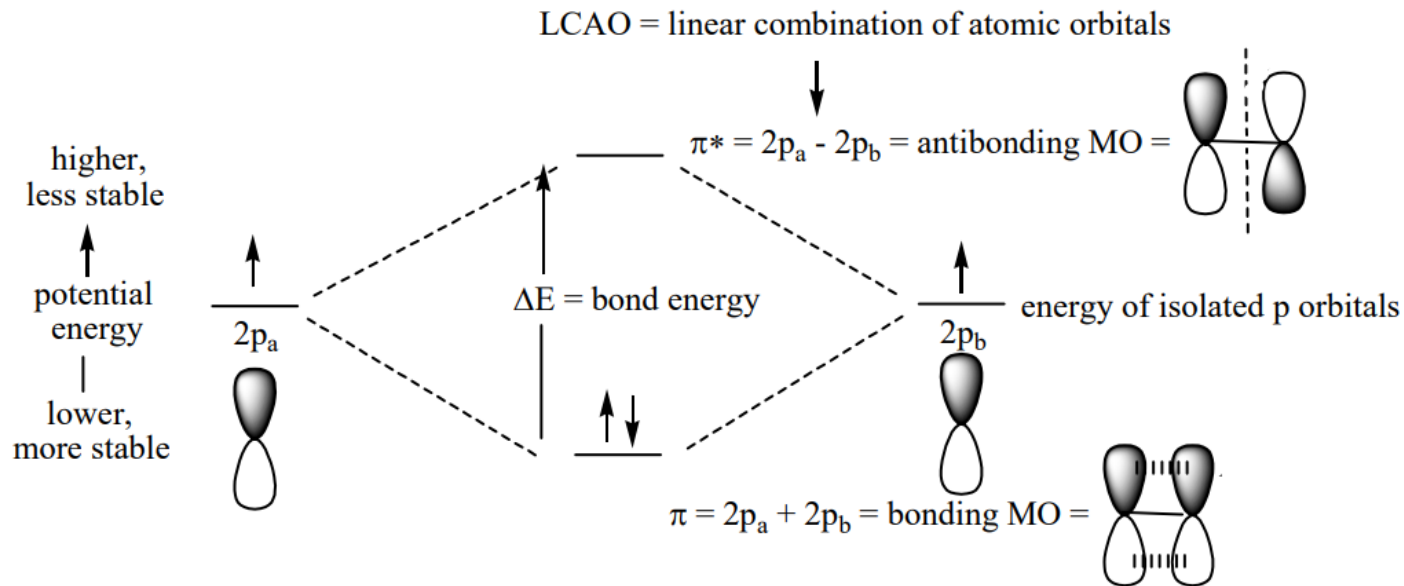
- Ο συνδυασμός των τροχιακών εντός φάσης οδηγεί σε ένα δεσμικό μοριακό τροχιακό (**π_p**).



ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ

Δεσμός π

Η αλληλοεπικάλυψη αυτή (πλευρική αλληλοεπικάλυψη των p ατομικών τροχιακών), λαμβάνει χώρα όταν υπάρχουν διπλοί και τριπλοί δεσμοί μεταξύ δύο ατόμων. Ενώ ένας δεσμός σίγμα είναι πάντα ο πρώτος δεσμός μεταξύ δύο ατόμων, ένας δεσμός π είναι πάντα ο δεύτερος δεσμός μεταξύ δύο ατόμων (ή και ο τρίτος δεσμός, εάν υπάρχει). Οι δεσμοί Πι χρησιμοποιούν τροχιακά 2p για να σχηματίσουν δεσμικά και αντιδεσμικά τροχιακά: $\pi = (2p_a + 2p_b)$ και $\pi^* = (2p_a - 2p_b)$.



$$\text{bond order of a pi bond} = \frac{(2) - (0)}{2} = 1 \text{ bond}$$

There is a big energy advantage for a pi bond over two isolated p orbitals.

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Όταν τα ατομικά τροχιακά που συνδυάζονται ανήκουν στο ίδιο άτομο, σχηματίζονται **υβριδοποιημένα ατομικά τροχιακά**.

- ✓ Καλύτερη επικάλυψη → Μεγαλύτερη πυκνότητα ηλεκτρονίων στο συγκεκριμένο μέρος του δεσμού → σχηματίζουν ισχυρότερους δεσμούς.
- ✓ Καλύτερη κατανομή ηλεκτρονίων στο χώρο (VSEPR, *Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory*).
- ✓ Δομική Ποικιλία των μορίων.
 - sp^3
 - sp^2
 - sp

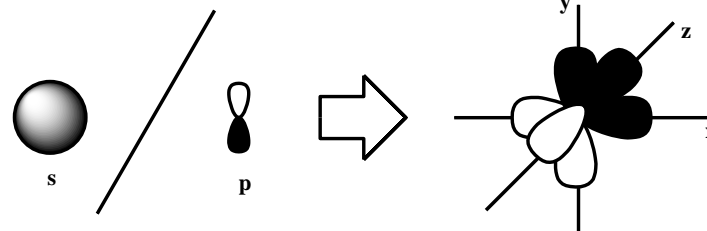
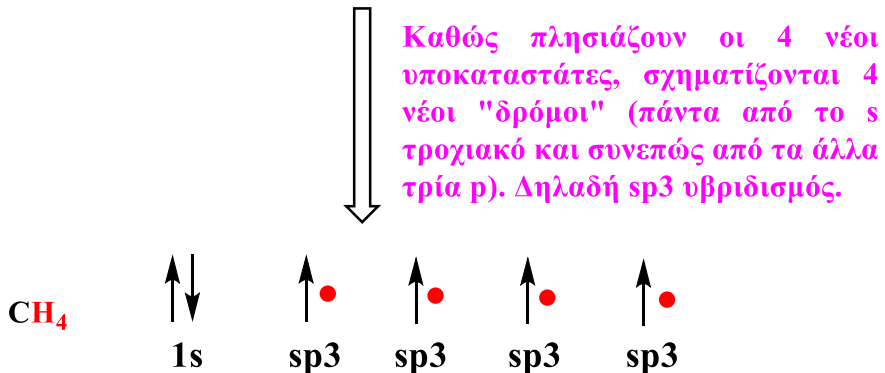
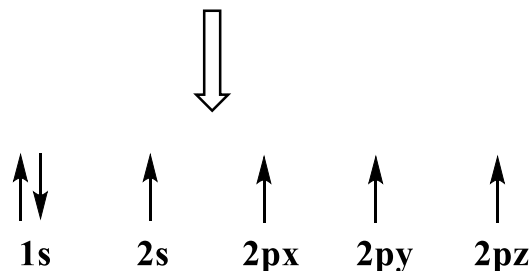
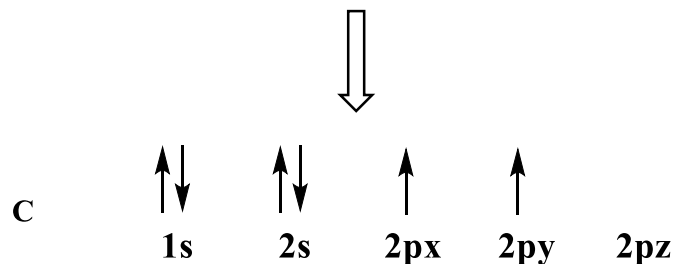
ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Υβριδισμός C του CH₄

sp³ υβριδισμός

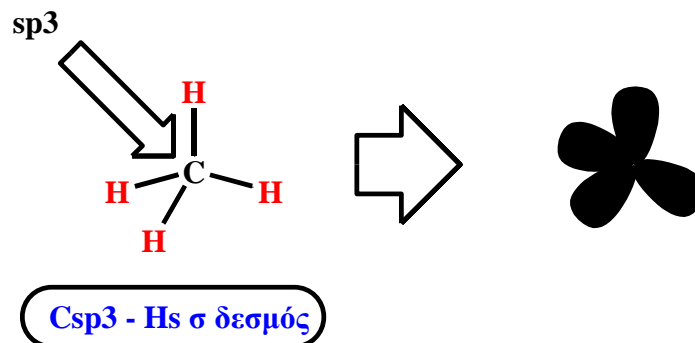


Ατομικά τροχιακά του C: 1s² 2s² 2p² = 6 e⁻



(άτομο C απομονωμένο)

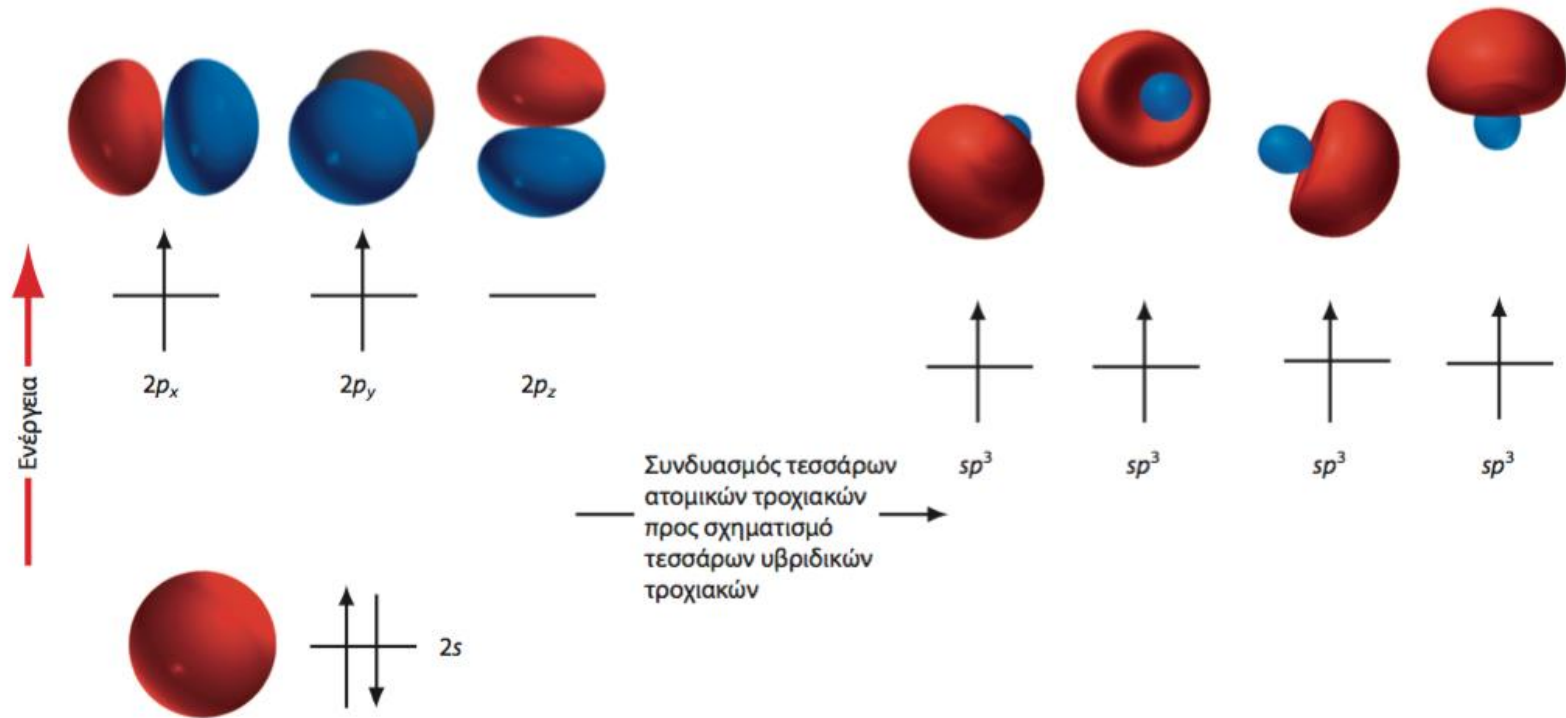
(άτομο C διεγερμένο)



Csp³ - Hs σ δεσμός

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

sp^3 υβριδισμός



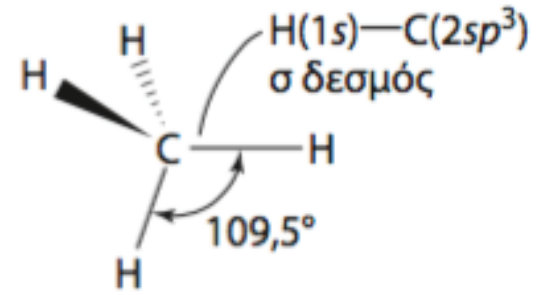
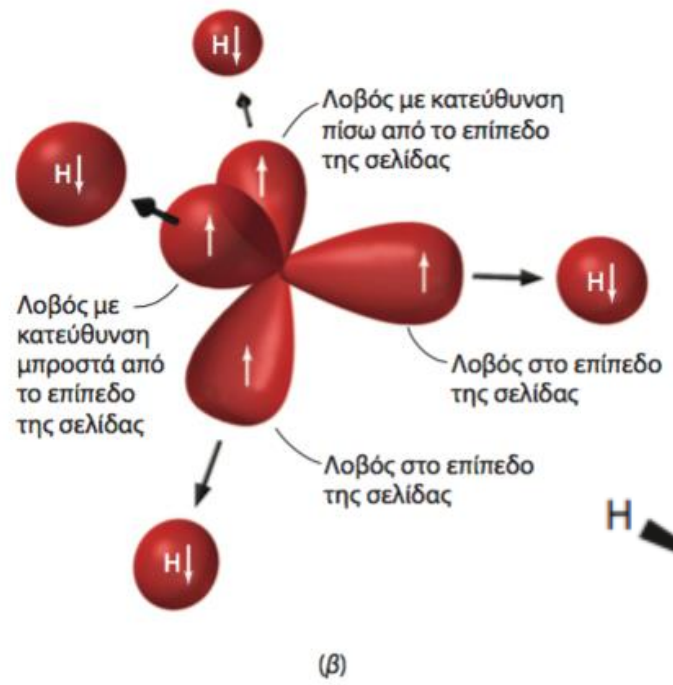
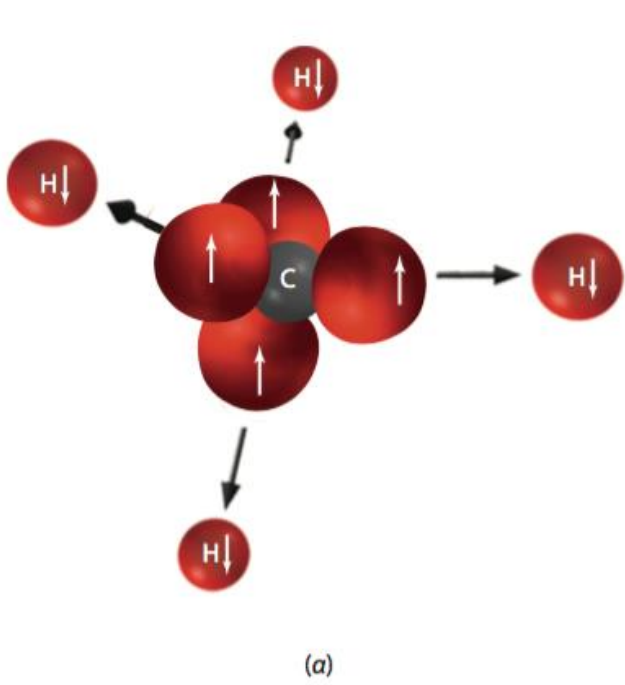
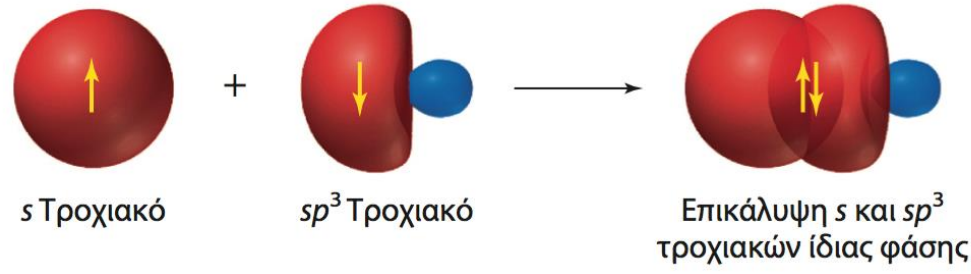
(α) Η πιο σταθερή ηλεκτρονιακή διαμόρφωση για ένα άτομο άνθρακα

(β) Κατάσταση υβριδισμού sp^3 για ένα άτομο άνθρακα

Καθώς πλησιάζουν 4 άτομα H, από τέσσερις διαφορετικές διευθύνσεις, θα έχουμε τη δημιουργία τεσσάρων νέων υβριδικών τροχιακών. Έτσι, το ένα s ατομικό τροχιακό (σφαιρικό) και τα τρία ατομικά τροχιακά συνδυάζονται σε **τέσσερα νέα sp^3 ατομικά τροχιακά**.

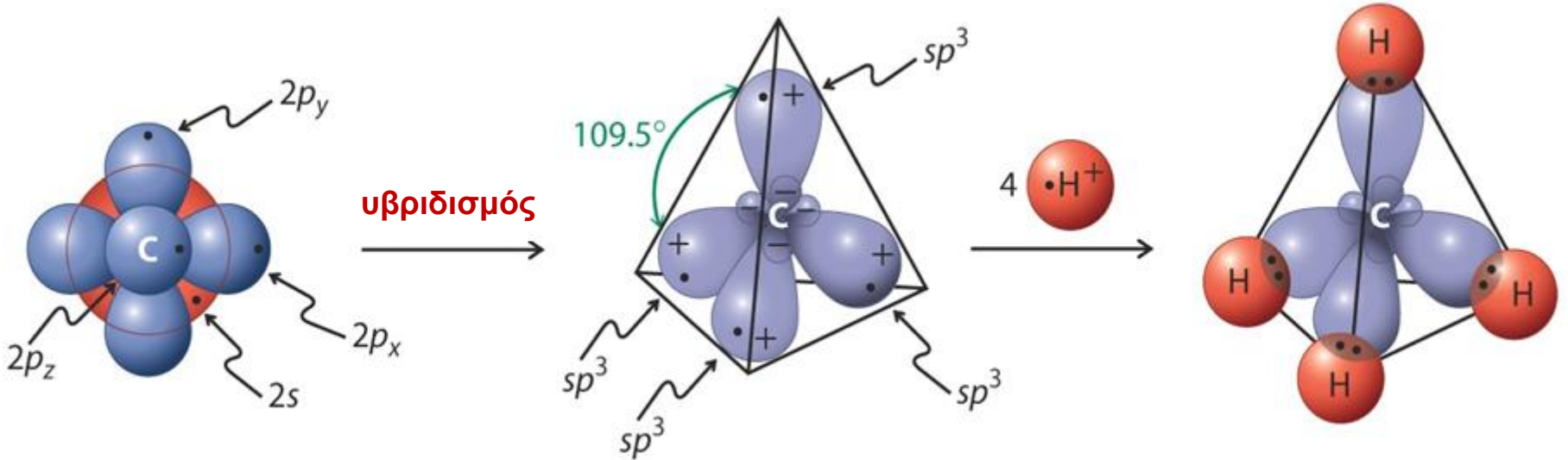
ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

sp^3 υβριδισμός



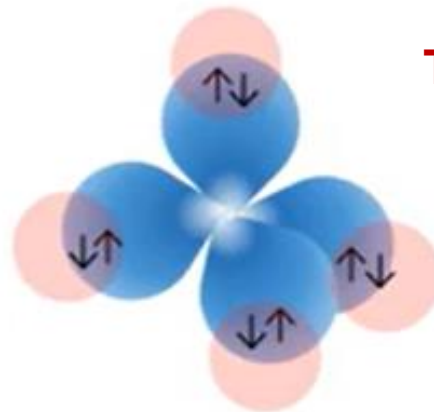
ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

sp^3 υβριδισμός



4 σ bonds H(s)-C(sp^3)

**Τετραεδρική δομή
του μεθανίου**

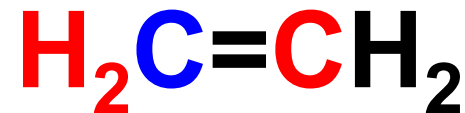


- ✓ Γωνίες δεσμού = 109.5°
- ✓ Γεωμετρία – Τετραεδρική
- ✓ Χαρακτήρας 's' – 25%
- ✓ 4 σ δεσμοί

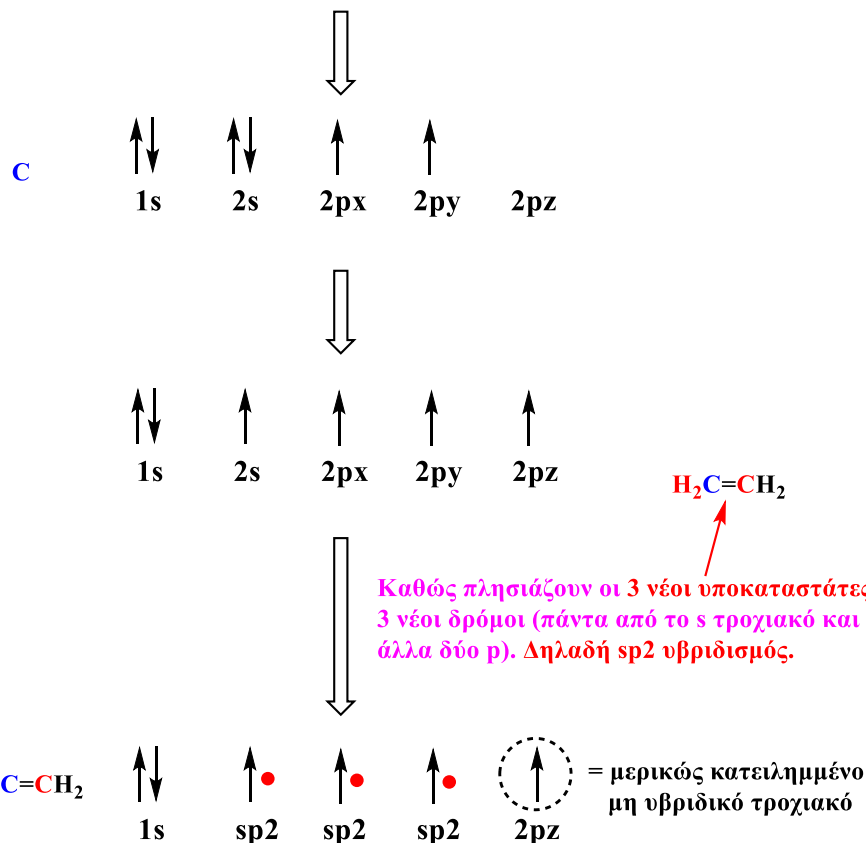
ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Υβριδισμός C του $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$

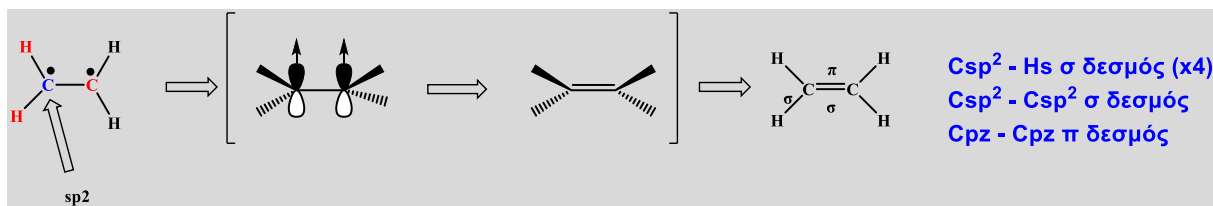
sp^2 υβριδισμός



Ατομικά τροχιακά του C: $1s^2 2s^2 2p^2 = 6 e^-$

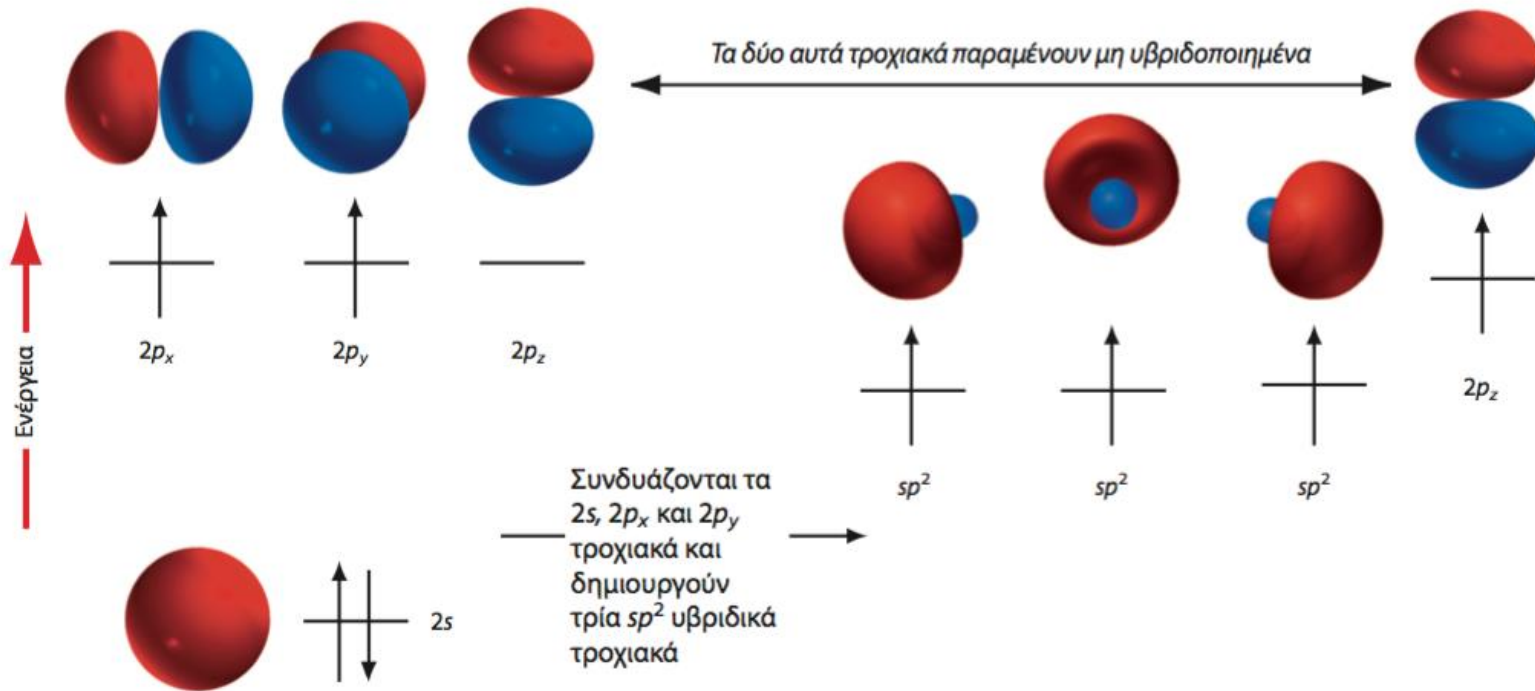
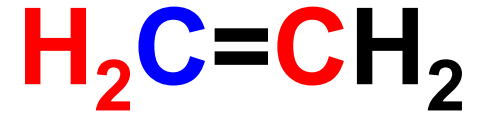


Ο π δεσμός στο αιθυλένιο δημιουργείται από **επικάλυψη ημιπλήρων p τροχιακών** γειτονικών ανθράκων



ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

sp^2 υβριδισμός



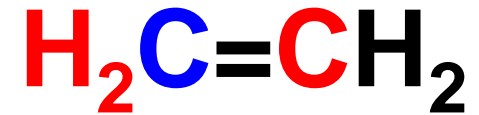
(α) Η ηλεκτρονιακή διαμόρφωση ενός ατόμου άνθρακα στη σταθερότερη κατάστασή του

(β) Κατάσταση υβριδισμού sp^2 για ένα άτομο άνθρακα

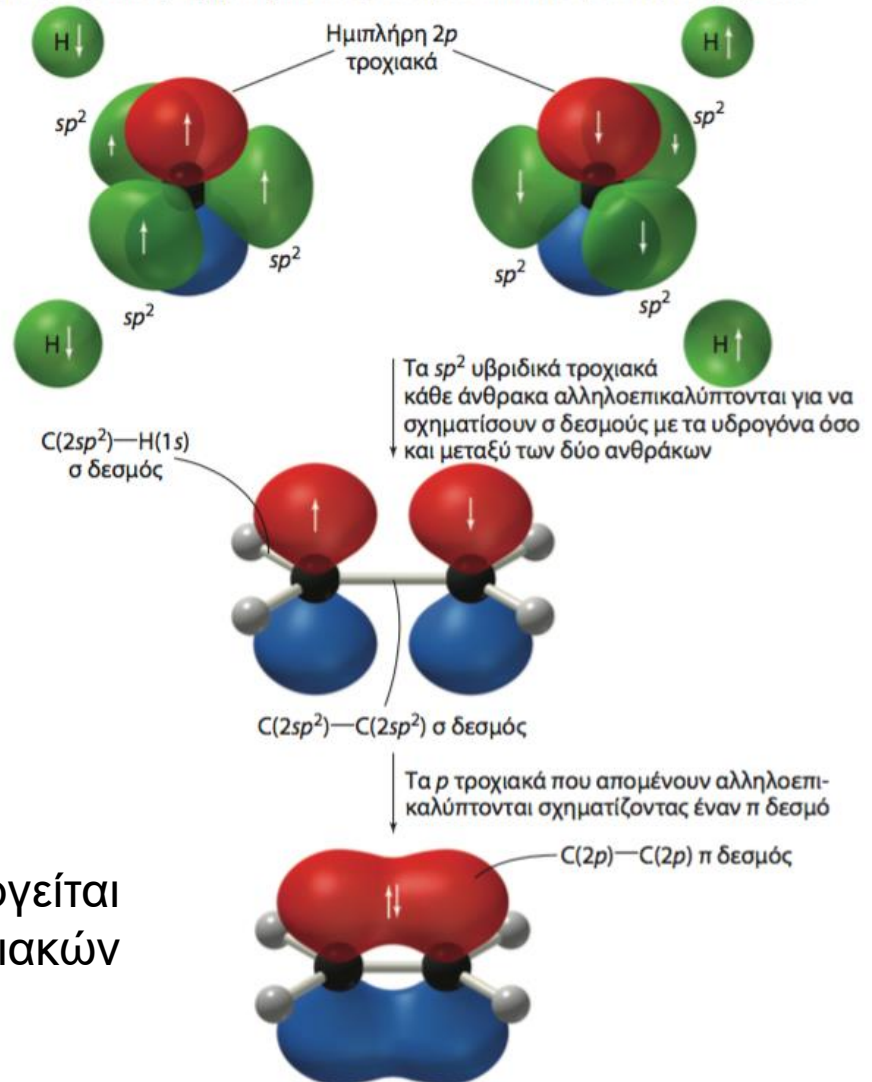
Καθώς πλησιάζουν δύο H και ένας C, από τρεις διαφορετικές διευθύνσεις, θα έχουμε τη δημιουργία τριών νέων υβριδικών τροχιακών. Έτσι, το ένα s ατομικό τροχιακό (σφαιρικό) και τα δύο p ατομικά τροχιακά συνδυάζονται (υβριδοποιούνται) -κατά τον άξονα που πλησιάζουν- σε **τρία νέα sp^2 ατομικά τροχιακά** και το ένα p ατομικό τροχιακό παραμένει μη υβριδοποιημένο.

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

sp^2 υβριδισμός



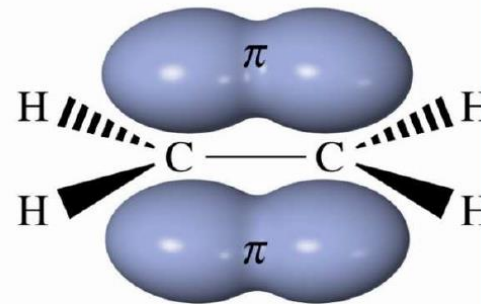
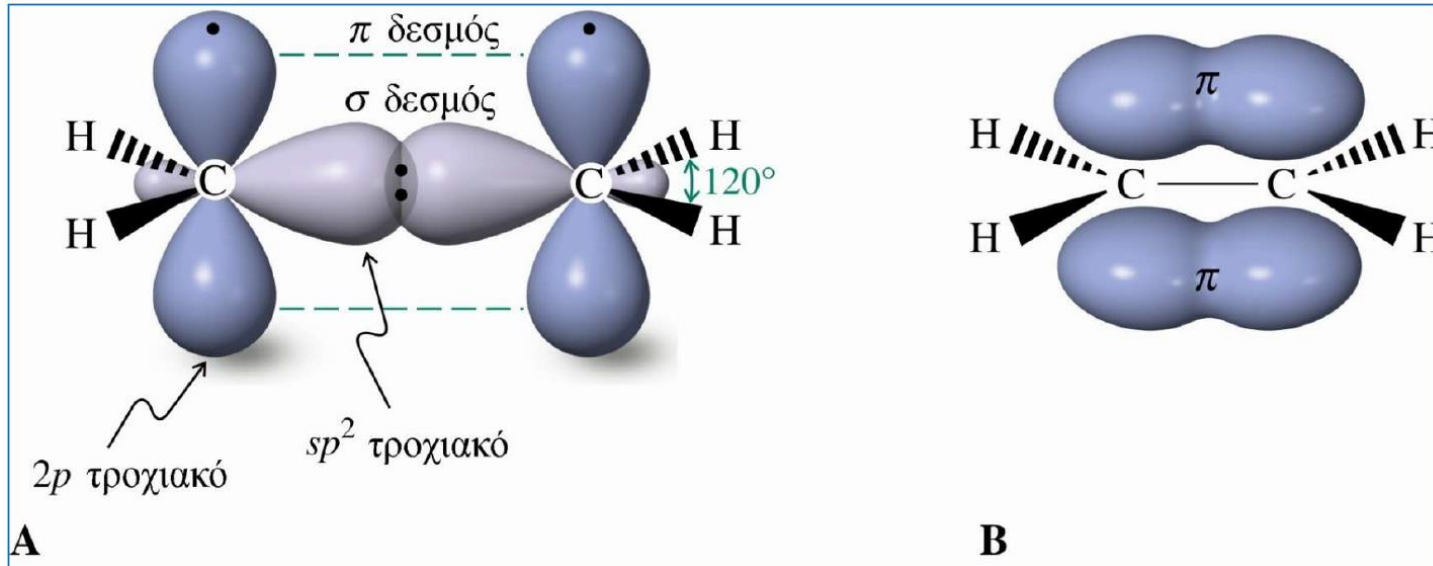
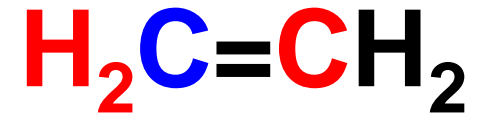
Ξεκινάμε με δύο sp^2 -υβριδισμένα άτομα άνθρακα και τέσσερα άτομα υδρογόνου:



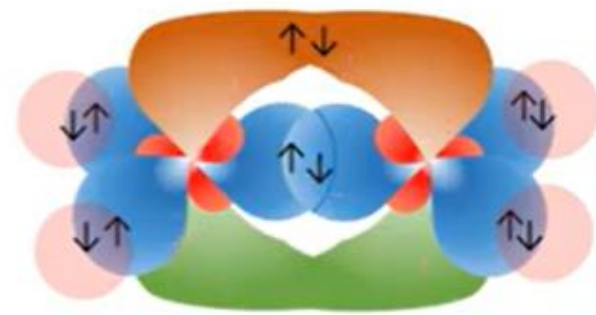
Ο π δεσμός στο αιθυλένιο δημιουργείται από επικάλυψη ημιπλήρων p τροχιακών γειτονικών ανθράκων.

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

sp^2 υβριδισμός



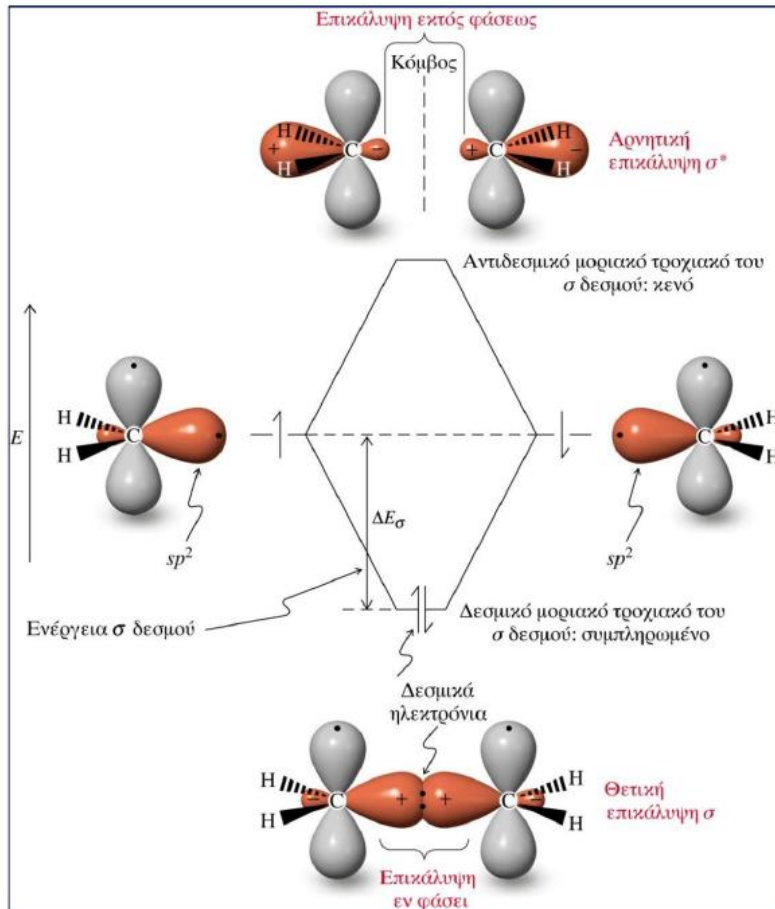
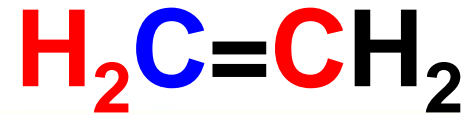
- ✓ Γωνίες δεσμού = 120°
- ✓ Γεωμετρία – Επίπεδη τριγωνική
- ✓ Χαρακτήρας 's' – 33.3%
- ✓ 3 σ δεσμοί
- ✓ 1 π δεσμός



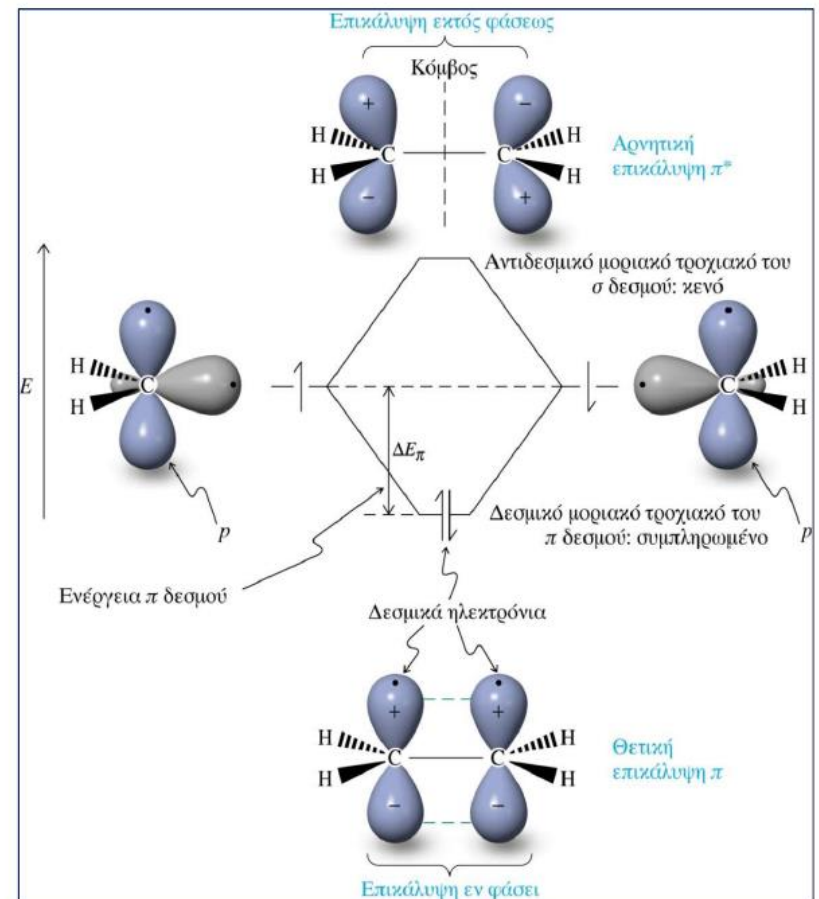
**Επίπεδη τριγωνική δομή
του αιθενίου**

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

sp^2 υβριδισμός



Επικάλυψη δύο sp^2 υβριδικών τροχιακών.
Σχηματισμός συμπληρωμένου σ δεσμικού μοριακού τροχιακού.



Επικάλυψη δύο p τροχιακών.
Σχηματισμός συμπληρωμένου π δεσμικού μοριακού τροχιακού

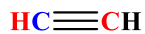
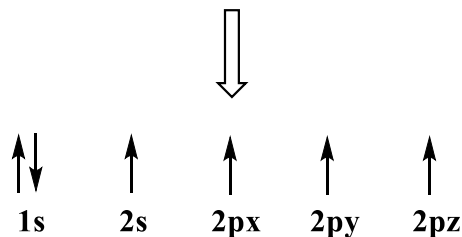
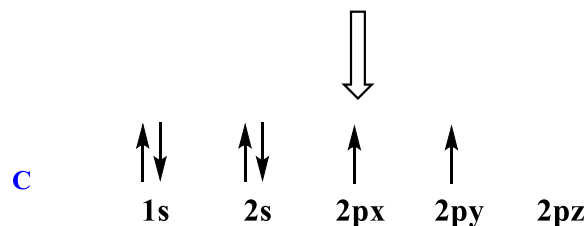
Ας συσχετίσουμε λίγο με τα μοριακά τροχιακά

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

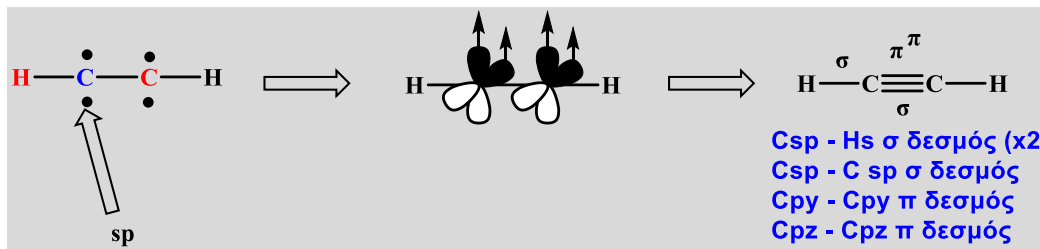
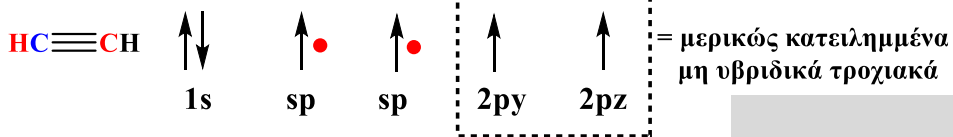
Υβριδισμός C του $\text{HC}\equiv\text{CH}$

Ατομικά τροχιακά του C: $1s^2 2s^2 2p^2 = 6 e^-$

sp υβριδισμός

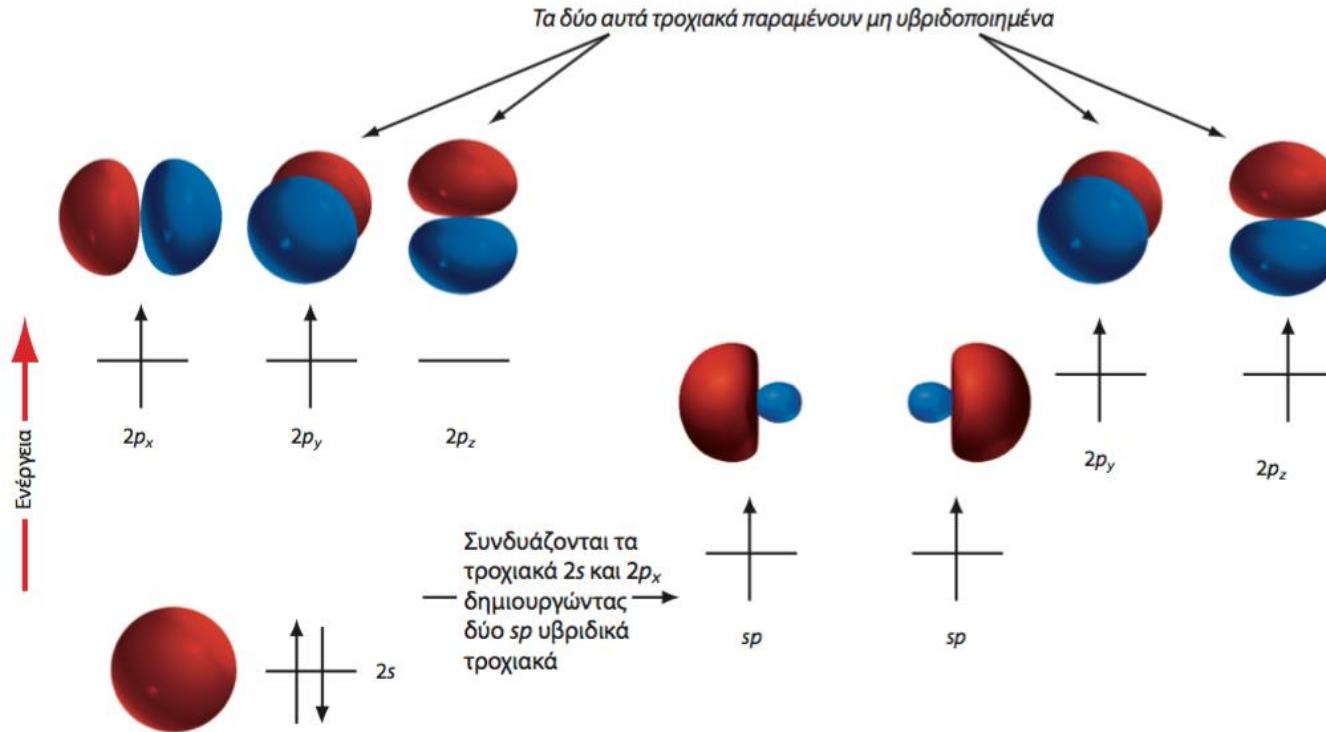
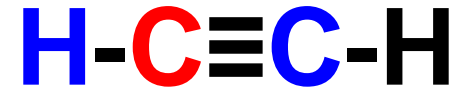


Καθώς πλησιάζουν οι 2 νέοι υποκαταστάτες, σχηματίζονται 2 νέοι δρόμοι (πάντα από το s τροχιακό και συνεπώς από το ένα p). Δηλαδή sp υβριδισμός.



ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

sp υβριδισμός



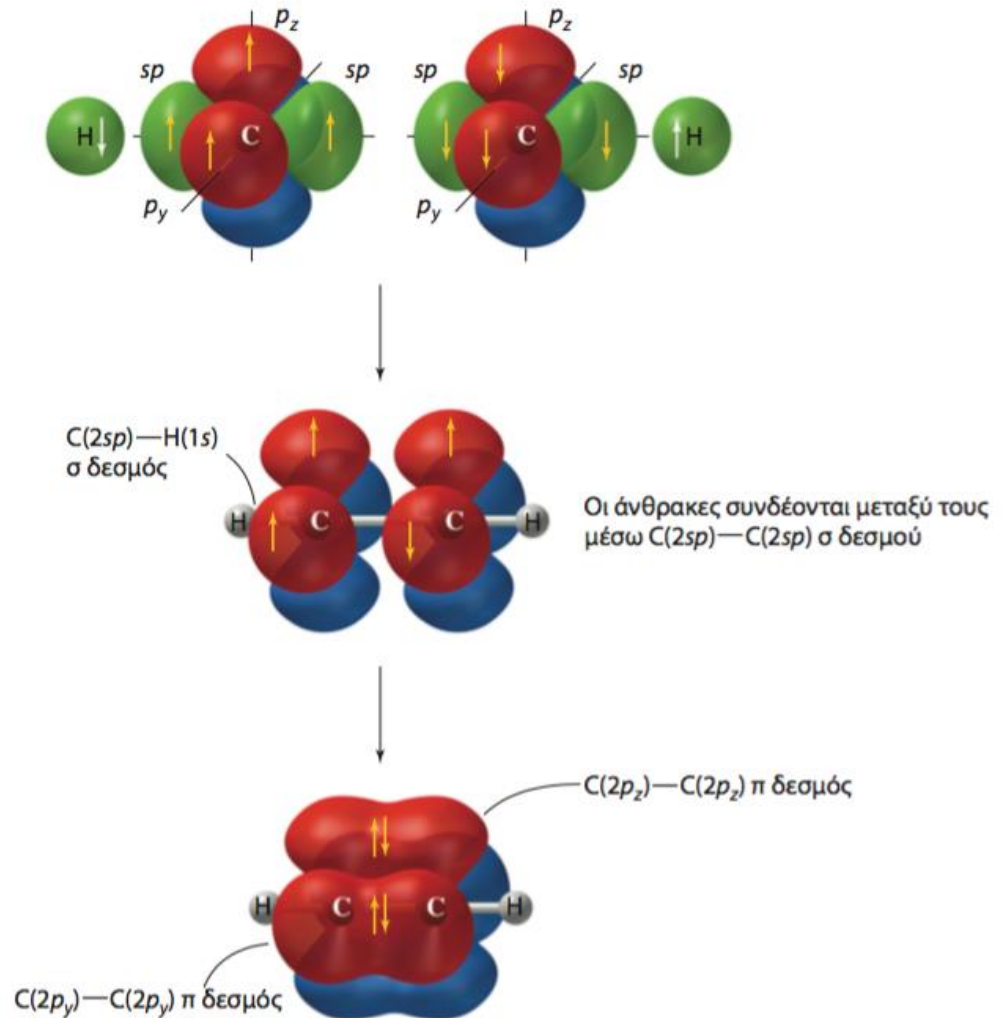
(α) Η ηλεκτρονική διαμόρφωση ενός ατόμου άνθρακα στη σταθερότερη κατάστασή του

(β) Κατάσταση υβριδισμού sp για ένα άτομο άνθρακα

Καθώς πλησιάζει ένα H και ένας C, από δύο διαφορετικές διευθύνσεις, θα έχουμε τη δημιουργία δύο νέων υβριδικών τροχιακών. Έτσι, το ένα s ατομικό τροχιακό (σφαιρικό) και το ένα p ατομικό τροχιακό συνδυάζονται (υβριδοποιούνται) -κατά τον άξονα που πλησιάζουν- σε **δύο νέα sp ατομικά τροχιακά** και τα δύο p ατομικά τροχιακά παραμένουν μη υβριδοποιημένο.

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

sp υβριδισμός



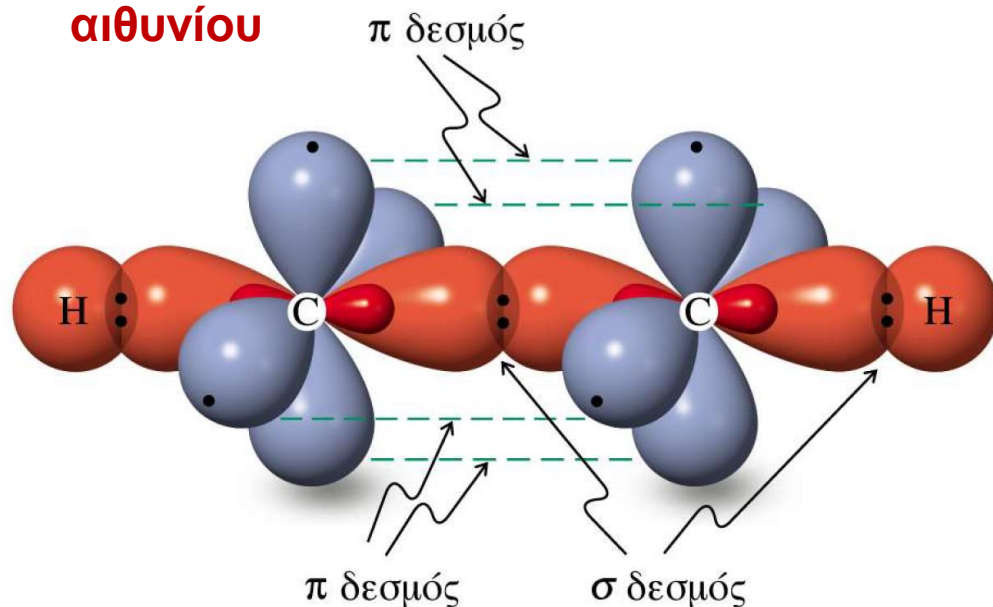
Οι δύο π δεσμοί στο ακετυλένιο δημιουργούνται από πλευρική επικάλυψη των ημιπλήρων δύο p τροχιακών των γειτονικών ανθράκων.

- Διατάσσονται σε ξεχωριστά επίπεδα ο καθένας που τέμνονται κάθετα μεταξύ τους.

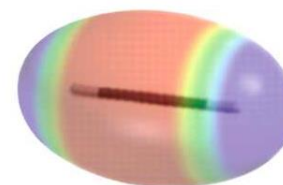
ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

sp υβριδισμός

Γραμμική δομή του
αιθυνίου

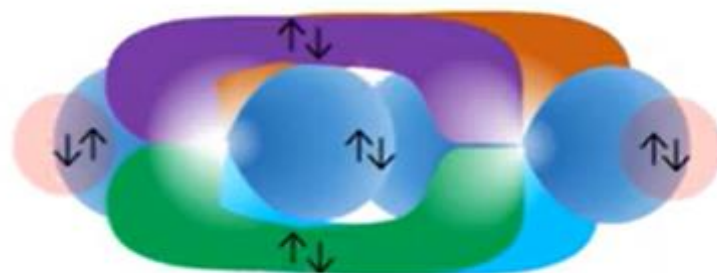


Χάρτης ηλεκτροστατικού
δυναμικού

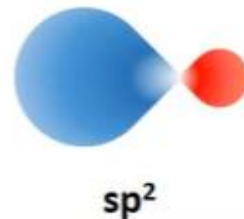
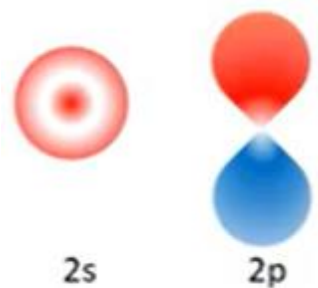


Μεγάλη ηλεκτρονική πυκνότητα
γύρω από το κεντρικό τμήμα του
μοριακού άξονα

- ✓ Γωνίες δεσμού = 180°
- ✓ Γεωμετρία – Γραμμική
- ✓ Χαρακτήρας 's' – 50%
- ✓ 2 σ δεσμοί
- ✓ 2 π δεσμοί



ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ



Τροχιακά	4 sp^3	3 sp^2 + 1 p puro	2 sp + 2 p pueros
↙	109.5°	120°	180°
Γεωμετρία	Τετραεδρική	Επίπεδη τριγωνική	Γραμμική
Υποκαταστάτες	4	3	2
Χαρακτήρας 's'	25 %	33.3 %	50 %
Μήκος δεσμού	+++	++	+
Δύναμη δεσμού	+	++	+++
	$C-C$ 154 pm 377 kJ/mol	$C=C$ 134 pm 728 kJ/mol	$C\equiv C$ 120 pm 965 kJ/mol

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Παράδειγμα 1.4: Να χαρακτηρισθούν τα είδη των υβριδισμών (sp , sp^2 , sp^3) και τα είδη των δεσμών (σ , π) στις παρακάτω ενώσεις.

Υπόδειξη

Ο υβριδισμός ενός ατόμου εξαρτάται από τον αριθμό των υποκαταστατών του.

Δηλ.:

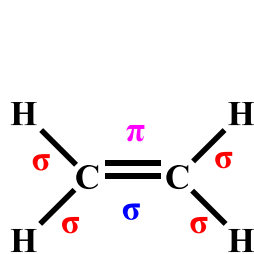
2 υποκαταστάτες: sp

3 υποκαταστάτες: sp^2

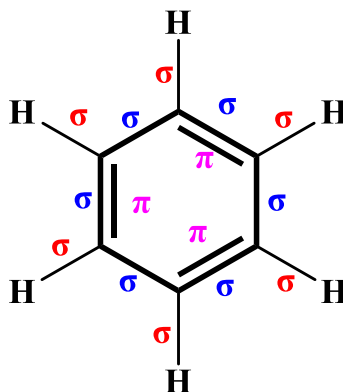
4 υποκαταστάτες: sp^3

Προσοχή:

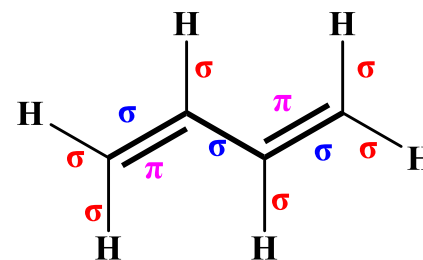
1. Το ζεύγος e^- θεωρείται υποκαταστάτης.
2. Όταν έχουμε ένα μόνο e^- δεν θεωρείται υποκαταστάτης.



C sp^2 - H σ δεσμός (4)
C sp^2 - C sp^2 σ δεσμός (1)
C p_z - C p_z π δεσμός (1)



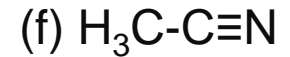
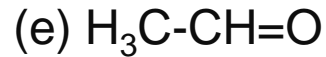
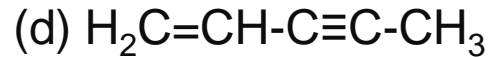
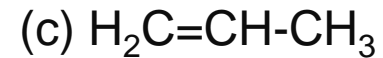
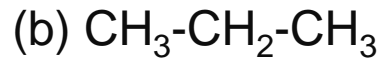
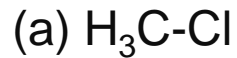
C sp^2 - H σ δεσμός (6)
C sp^2 - C sp^2 σ δεσμός (6)
C p_z - C p_z π δεσμός (3)



C sp^2 - H σ δεσμός (6)
C sp^2 - C sp^2 σ δεσμός (3)
C p_z - C p_z π δεσμός (2)

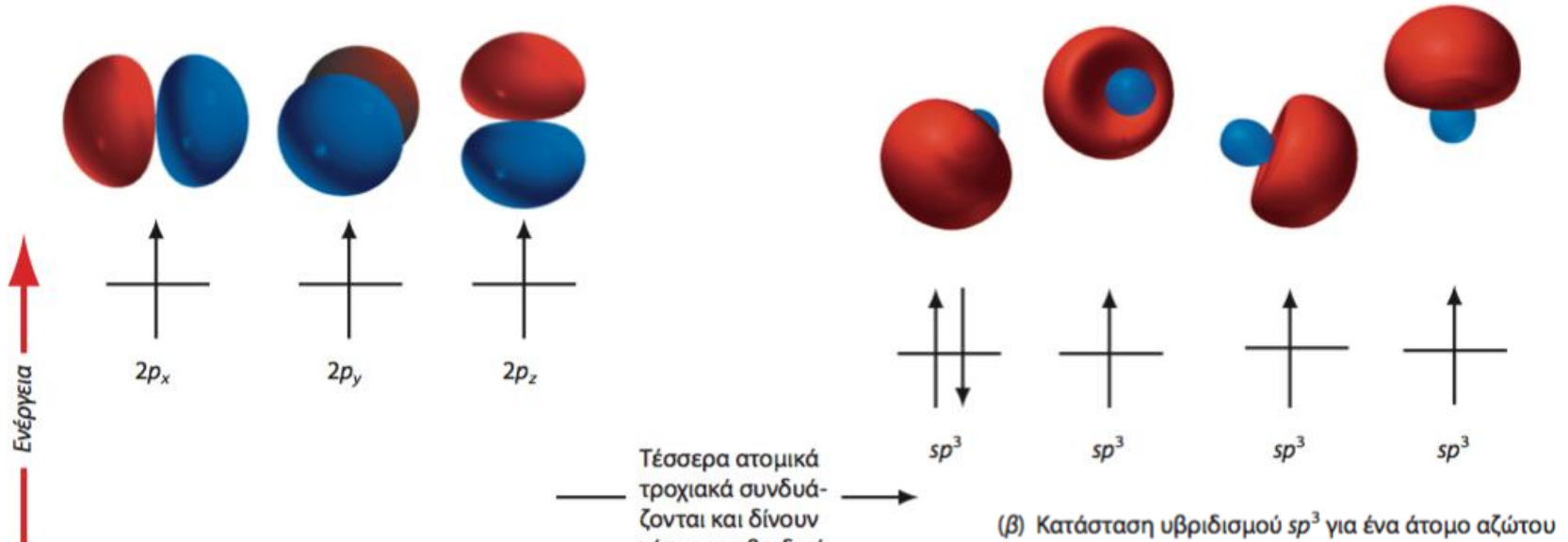
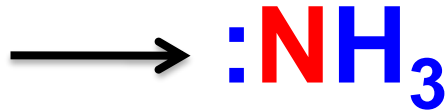
ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Άσκηση 1.15: Υποδείξτε τον υβριδισμό που παρουσιάζει κάθε από τα άτομα άνθρακα στις ακόλουθες δομές.



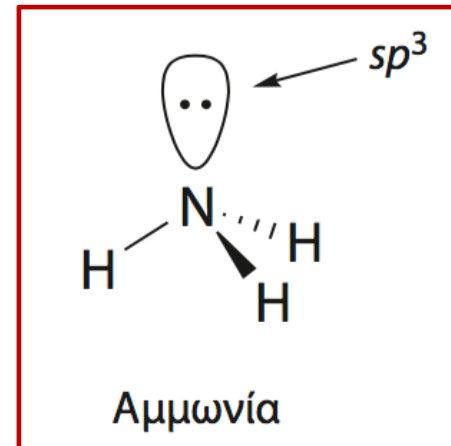
ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Υπολογίζεται ως
υποκαταστάτης



(α) Η σταθερότερη ηλεκτρονιακή διαμόρφωση για ένα άτομο αζώτου

(β) Κατάσταση υβριδισμού sp^3 για ένα άτομο αζώτου



ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Ο υβριδισμός ενός ατόμου εξαρτάται από τον αριθμό των υποκαταστατών του.

Δηλ.:

2 υποκαταστάτες: sp

3 υποκαταστάτες: sp^2

4 υποκαταστάτες: sp^3

Προσοχή:

1. Το ζεύγος e^- θεωρείται ως υποκαταστάτης.
2. Μονήρες e^- (ένα e^-) δεν λαμβάνεται υπόψη (δεν θεωρείται υποκαταστάτης)

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Υβριδισμός → Δομή

sp^3 → τετράεδρο

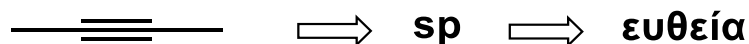
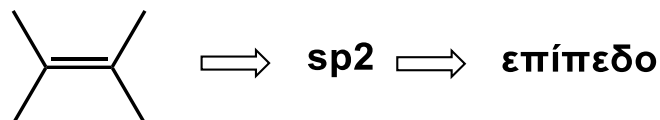
4 υποκαταστάτες

sp^2 → επίπεδο

3 υποκαταστάτες

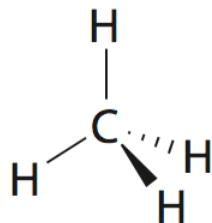
sp → ευθεία

2 υποκαταστάτες



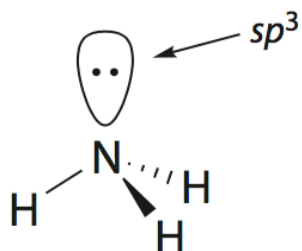
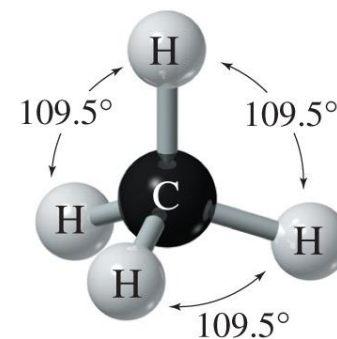
ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Υβριδισμός → Δομή



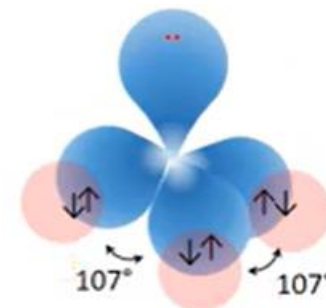
Μεθάνιο

4 υποκαταστάτες
Δημιουργούνται 4 νέοι δρόμοι
4 ατομικά τροχιακά συνδυάζονται (s + τρία p)
και δημιουργούν 4 υβριδικά sp^3 τροχιακά

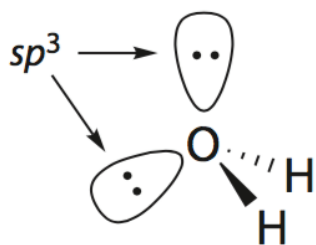


Αμμωνία

3 υποκαταστάτες και ένα ελεύθερο ζεύγος e-
(Αντιμετωπίζεται σαν 4 υποκαταστάτες)
Δημιουργούνται 4 νέοι δρόμοι
4 ατομικά τροχιακά συνδυάζονται (s + τρία p)
και δημιουργούν 4 υβριδικά sp^3 τροχιακά

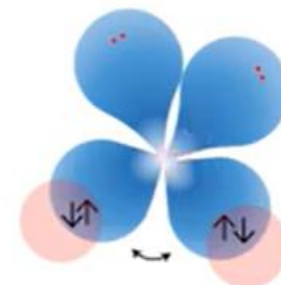


Ερ. Γιατί η γωνία του δεσμού H-N-H ελαττώνεται?



Νερό

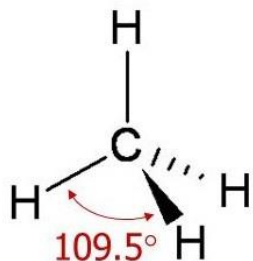
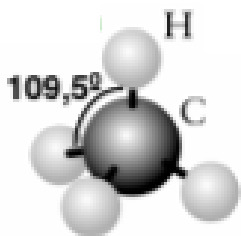
2 υποκαταστάτες και δύο ελεύθερα ζεύγη e-
(Αντιμετωπίζεται σαν 4 υποκαταστάτες)
Δημιουργούνται 4 νέοι δρόμοι
4 ατομικά τροχιακά συνδυάζονται (s + τρία p)
και δημιουργούν 4 υβριδικά sp^3 τροχιακά



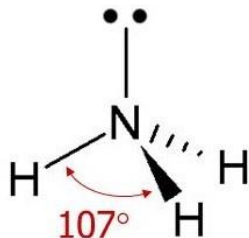
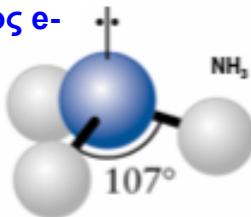
Ερ. Τι αναμένετε για τη γωνία του δεσμού H-O-H ?

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

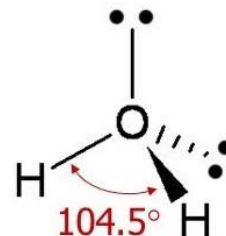
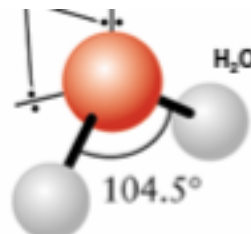
Υβριδισμός → Δομή



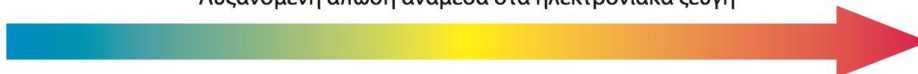
1 μονήρες ζεύγος e⁻



2 μονήρη ζεύγος e⁻



Αυξανόμενη άπωση ανάμεσα στα ηλεκτρονιακά ζεύγη

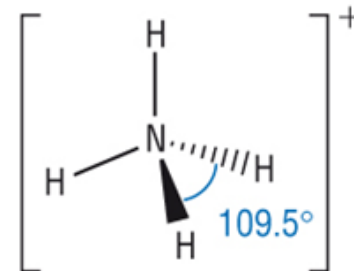
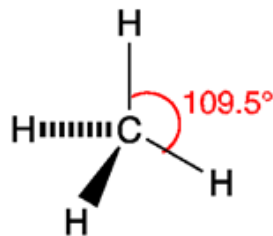


δεσμικό-δεσμικό
Ελάχιστη δυνατή άπωση

< μη δεσμικό-δεσμικό

< μη δεσμικό-μη δεσμικό
Μέγιστη δυνατή άπωση

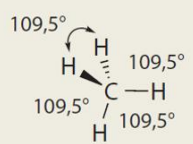
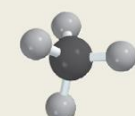
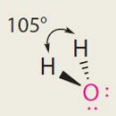

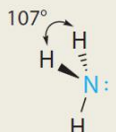
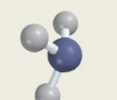
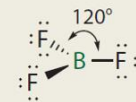
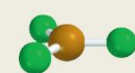
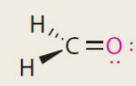
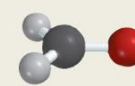
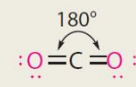

Τα μη δεσμικά e⁻ τροποποιούν τη γεωμετρία σε σχέση με άτομα χωρίς αυτά - μειώνουν τις γωνίες δεσμού μεταξύ των δεσμικών e⁻.

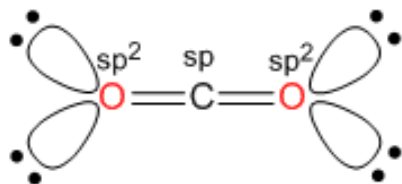


ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Υβριδισμός → Δομή

Μοντέλο VSEPR → Δομή
(Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory)

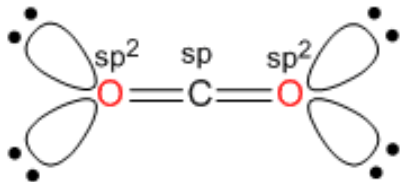
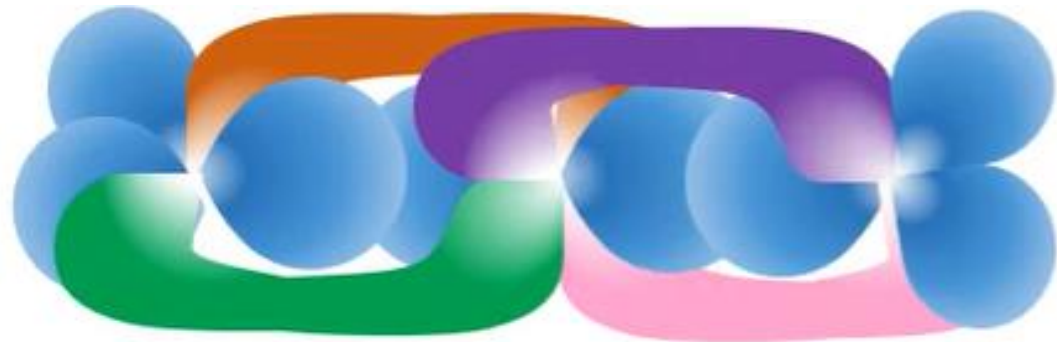
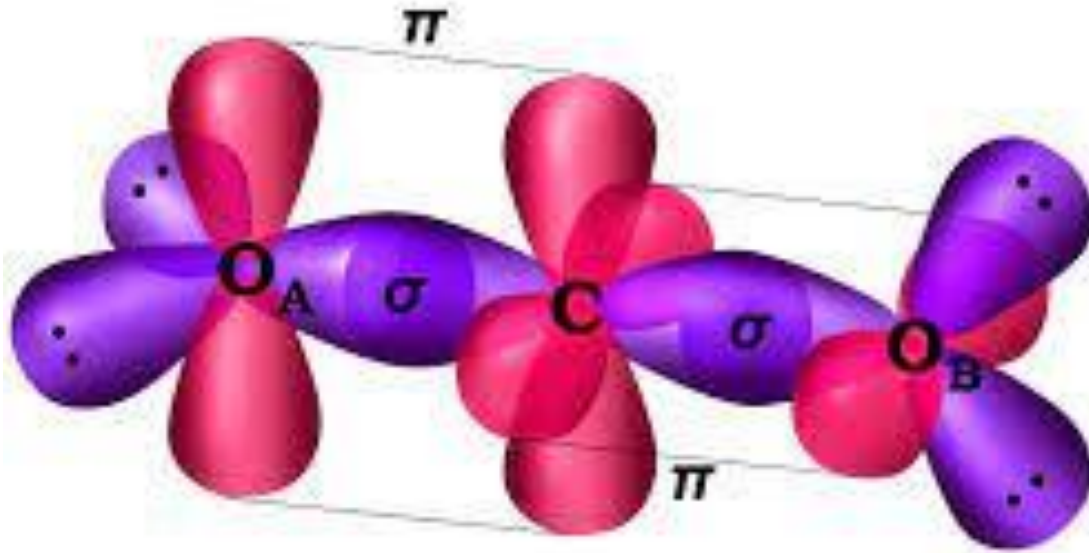
Ένωση	Δομικός τύπος	Απωθούμενα ηλεκτρονιακά ζεύγη	Διευθέτηση απωθούμενων ζευγών	Μοριακή δομή	Μοριακό μοντέλο
Μεθάνιο (CH ₄)		Ο άνθρακας έχει τέσσερα δεσμικά ζεύγη	Τετραεδρική	Τετραεδρική	
Νερό (H ₂ O)		Το οξυγόνο έχει δύο δεσμικά ζεύγη + δύο μη δεσμικά	Τετραεδρική	Κεκαμμένη	
Αμμωνία (NH ₃)		Το άζωτο έχει τρία δεσμικά ζεύγη + ένα μη δεσμικό	Τετραεδρική	Τριγωνική πυραμιδική	
Τριφθοριούχο βόριο (BF ₃)		Το βόριο έχει τρία δεσμικά ζεύγη	Επίπεδη τριγωνική	Επίπεδη τριγωνική	
Φορμαλδεΰδη (H ₂ CO)		Ο άνθρακας έχει δύο δεσμικά ζεύγη + έναν διπλό δεσμό, ο οποίος θεωρείται ένα δεσμικό ζεύγος	Επίπεδη τριγωνική	Επίπεδη τριγωνική	
Διοξείδιο του άνθρακα (CO ₂)		Ο άνθρακας έχει δύο διπλούς δεσμούς, που θεωρούνται δύο δεσμικά ζεύγη	Γραμμική	Γραμμική	



ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Υβριδισμός → Δομή

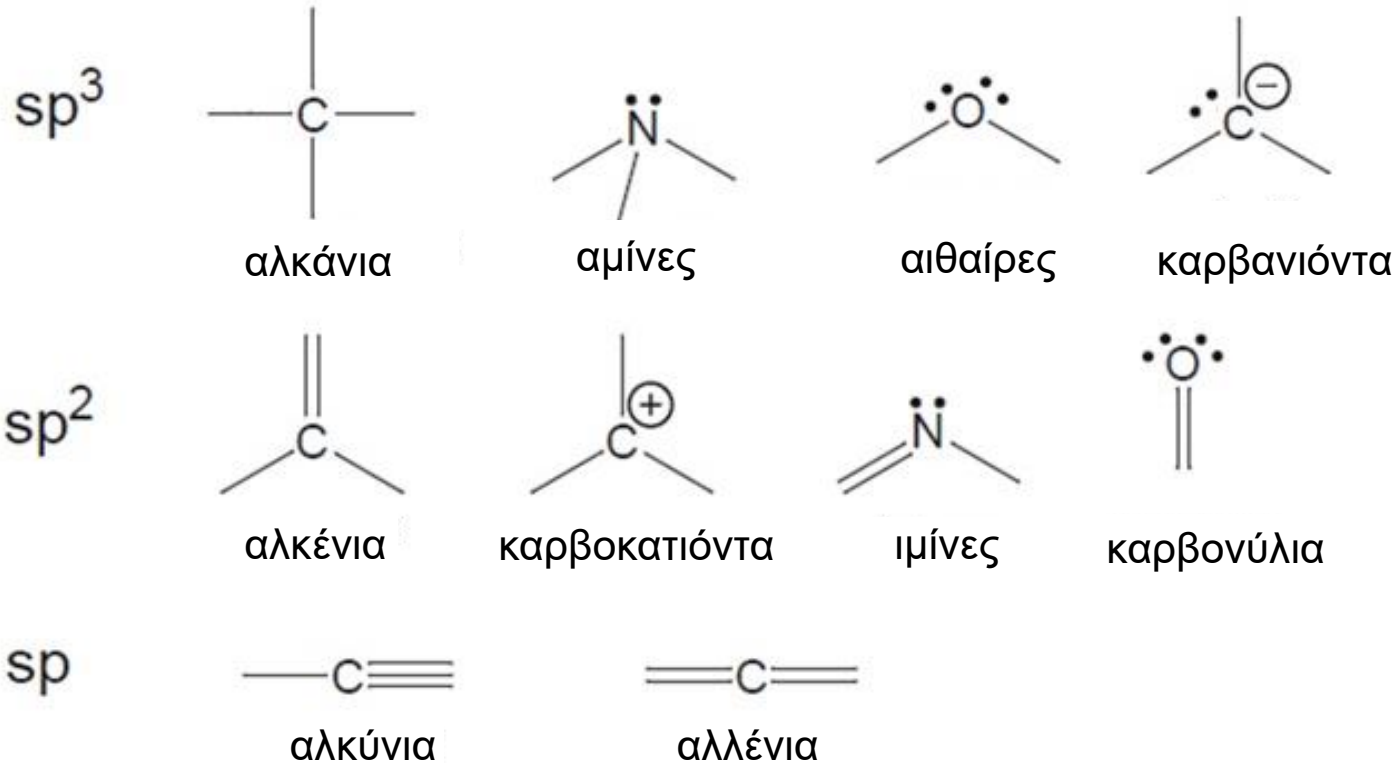
Μοντέλο VSEPR → Δομή
(Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory)



ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Υβριδισμός → Δομή

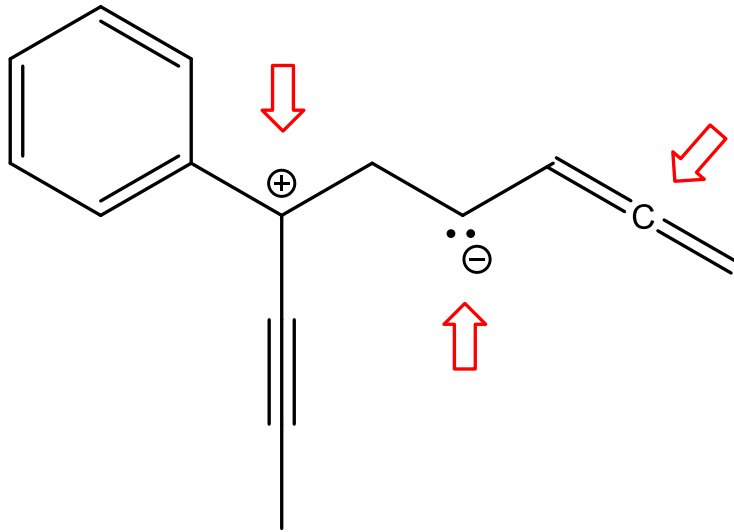
Μοντέλο VSEPR → Δομή
(Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory)



ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Παράδειγμα 1.5: Ποιος είναι ο σωστός υβριδισμός του κάθε C στην παρακάτω ένωση;

Προσοχή ιδιαίτερως στα μαρκαρισμένα σημεία

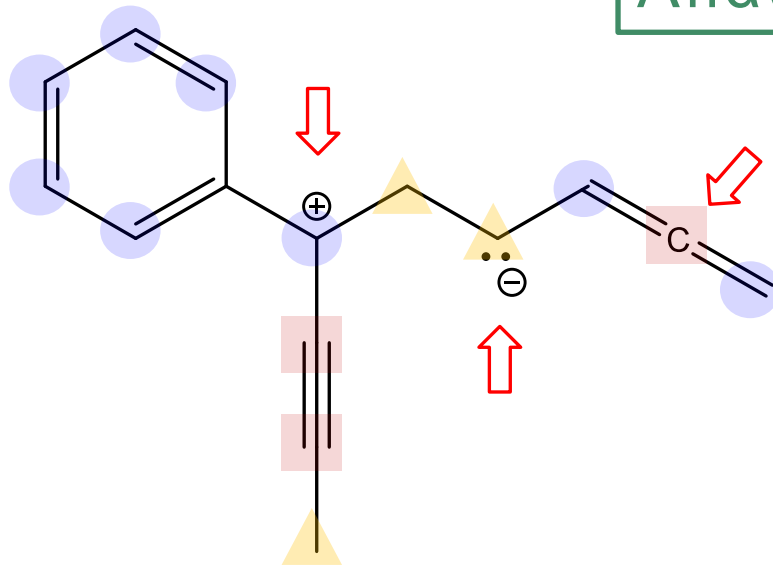





ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Παράδειγμα 1.5: Ποιος είναι ο σωστός υβριδισμός του κάθε C στην παρακάτω ένωση;

Προσοχή ιδιαίτερως στα μαρκαρισμένα σημεία

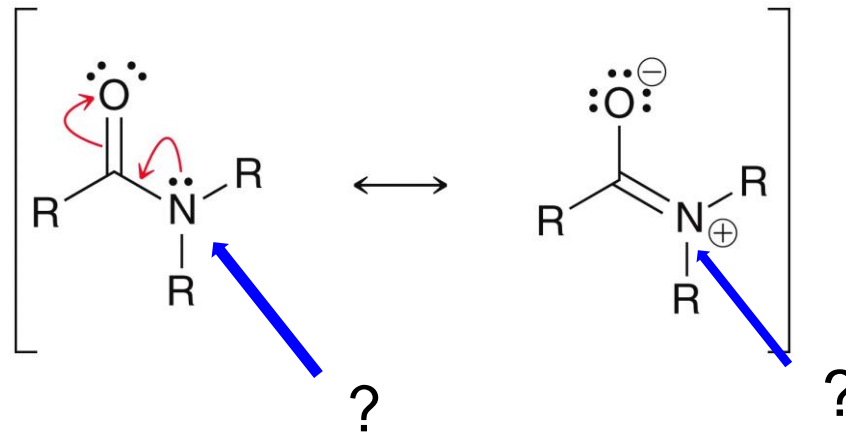
Απάντηση



-  **sp³**: 4 υποκαταστάτες
-  **sp²**: 3 υποκαταστάτες
-  **sp**: 2 υποκαταστάτες

ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

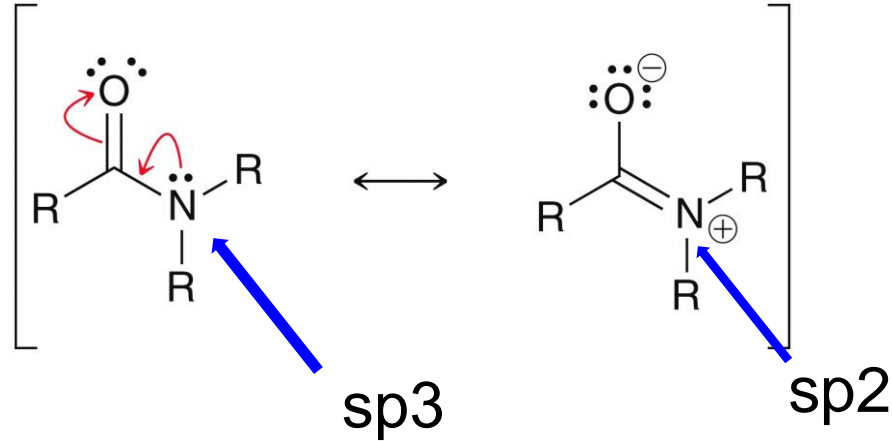
Παράδειγμα 1.6: Ποιος είναι ο σωστός υβριδισμός του N στις παρακάτω μεσομερείς δομές;



ΥΒΡΙΔΙΣΜΟΣ

Παράδειγμα 1.6: Ποιος είναι ο σωστός υβριδισμός του N στις παρακάτω μεσομερείς δομές;

Απάντηση



Το μονήρες ζεύγος e^- θεωρείται υποκαταστάτης, έτσι το N είναι sp^3 υβριδοποιημένο.

Το μονήρες ζεύγος e^- του N αποθωρακίζεται, μέσω επικάλυψης των γειτονικών p -τροχιακών. Έτσι το N είναι sp^2 υβριδοποιημένο.