



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ  
ΠΑΤΡΩΝ  
UNIVERSITY OF PATRAS

ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά  
μαθήματα ΠΠ

# Οργανική Χημεία

ΕΝΟΤΗΤΑ 2:

ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ ΚΑΙ ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΟΜΗ

Ε. Αμανατίδης

Πολυτεχνική Σχολή

Τμήμα Χημικών Μηχανικών

# Χημικοί Δεσμοί και Μοριακή Δομή: Σύνοψη

## • Χημικός Δεσμός

- ✓ ΕΙΔΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΕΣΜΩΝ
- ✓ ΔΟΜΕΣ LEWIS ΚΑΙ ΚΑΝΟΝΑΣ ΟΚΤΑΔΩΝ
- ✓ ΕΞΑΙΡΕΣΕΙΣ ΤΟΥ ΚΑΝΟΝΑ ΤΩΝ ΟΚΤΑΔΩΝ

## • Μοριακή Δομή

- ✓ ΑΤΟΜΙΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ
- ✓ ΜΟΡΙΑΚΑ ΤΡΟΧΙΑΚΑ
- ✓ ΕΞΑΙΡΕΣΕΙΣ ΤΟΥ ΚΑΝΟΝΑ ΤΩΝ ΟΚΤΑΔΩΝ
- ✓ Η ΔΟΜΗ ΤΟΥ ΜΕΘΑΝΙΟΥ ΚΑΙ ΑΙΘΑΝΙΟΥ –  $sp^3$  υβριδισμός
- ✓ Η ΔΟΜΗ ΤΟΥ ΑΙΘΥΛΕΝΙΟΥ –  $sp^2$  υβριδισμός
- ✓ Η ΔΟΜΗ ΤΟΥ ΑΚΕΤΥΛΕΝΙΟΥ –  $sp$  υβριδισμός
- ✓ ΜΟΡΙΑΚΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ
- ✓ ΕΡΜΗΝΕΙΑ ΚΑΙ ΚΑΤΑΓΡΑΦΗ ΔΟΜΩΝ
- ✓ ΣΥΖΥΓΙΑ ΚΑΙ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΣ

# ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ ΚΑΙ ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΟΜΗ

**A. ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ: Ο ΚΑΝΟΝΑΣ ΤΗΣ ΣΥΜΠΛΗΡΩΜΕΝΗΣ ΟΚΤΑΔΑΣ**

B. ΔΟΜΕΣ ΚΑΤΑ LEWIS - ΕΞΑΙΡΕΣΕΙΣ ΑΠΟ ΤΟ ΚΑΝΟΝΑ ΤΗΣ ΟΚΤΑΔΑΣ

Γ. ΤΥΠΙΚΟ ΦΟΡΤΙΟ

Δ. ΘΕΩΡΙΑ ΑΠΩΣΗΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΩΝ ΖΕΥΓΩΝ ΣΤΗ ΣΤΟΙΒΑΔΑ ΣΘΕΝΟΥΣ

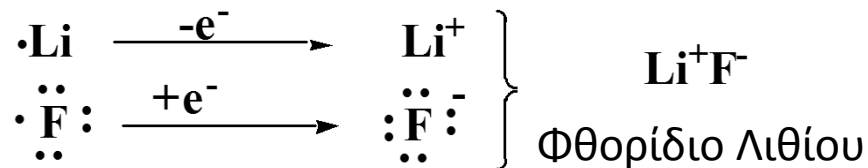
E. ΔΟΜΕΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΥ

# Χημικοί Δεσμοί

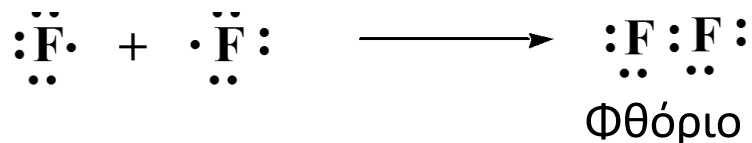
Η πρώτη προσπάθεια περιγραφής της φύσης των χημικών δεσμών έγινε από τον G.N. Lewis (1875 – 1946) και W. Kossel (1888 – 1956)

## Δύο είδη δεσμών

(A) **Ιοντικοί δεσμοί** σχηματίζονται με τη μεταφορά ενός ηλεκτρονίου σθένους από το ένα άτομο στο άλλο



(B) **Ομοιοπολικοί δεσμοί** σχηματίζονται όταν τα άτομα μοιράζονται ηλεκτρόνια σθένους



Και οι δύο τύποι οδηγούν σε ηλεκτρονιακές διαμορφώσεις γύρω από τα άτομα που μιμούνται την εξωτερική στοιβάδα των ευγενών αερίων

# Ιοντικός Δεσμός

Όταν άτομα χάνουν ή κερδίζουν ηλεκτρόνια, αναπτύσσουν φορτία και καλούνται ιόντα. Τα θετικά φορτισμένα καλούνται **κατιόντα** και τα αρνητικά φορτισμένα καλούνται **ανιόντα**.



Κατιόν Λιθίου



Ανιόν Φθωρίου

# Ηλεκτραρνητικότητα

Η **ηλεκτραρνητικότητα** μετράει τη τάση των ατόμων να έλκουν ηλεκτρόνια. Η ηλεκτραρνητικότητα αυξάνει όπως πηγαίνουμε από αριστερά προς στα δεξιά σε μια γραμμή του περιοδικού πίνακα. Σε μερικές ομάδες η ηλεκτραρνητικότητα ελαττώνεται καθώς πηγαίνουμε από πάνω προς τα κάτω.

Γραμμή 2  $\xrightarrow{\text{Li Be B C N O}}$   
Αύξηση ηλεκτραρνητικότητας

Στήλη 7  
F  
Cl  
Br  
I  
↓  
Ελάττωση  
ηλεκτραρνητικότητας

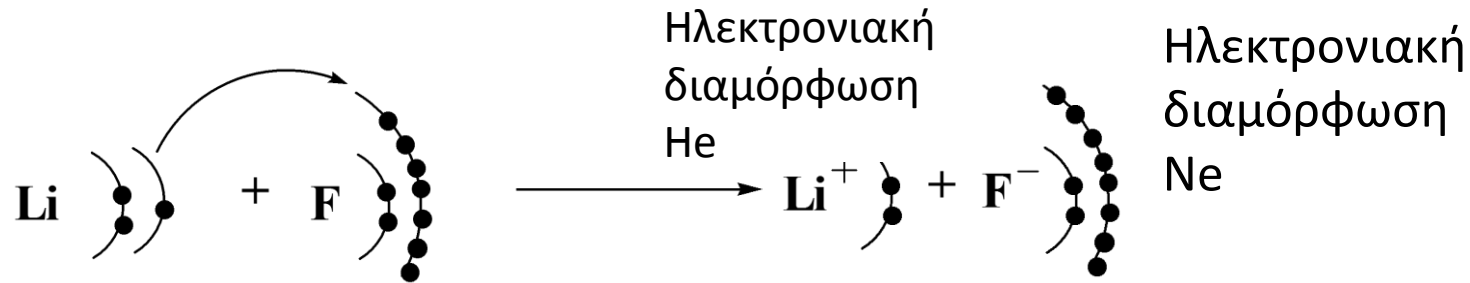
# Ηλεκτραρνητικότητα και τύποι χημικών δεσμών

Η διαφορά ηλεκτραρνητικότητας μεταξύ αλληλεπιδρώντων ατόμων προσδιορίζει τον τύπο του δεσμού που σχηματίζεται.

Χημική Ένωση	F <sub>2</sub>	HF	LiF
Διαφορά Ηλεκτραρνητικότητας	4.0 – 4.0 = 0	4.0 - 2.1 = 1.9	4.0 - 1.0 = 3.0
Τύπος Δεσμού	Μη πολικός ομοιοπολικός	Πολικός ομοιοπολικός	Ιοντικός

# Φθορίδιο του λιθίου

- Το Λίθιο ανήκει στην κατηγορία των μετάλλων και έχει **πολύ χαμηλή ηλεκτραρνητικότητα**. Το Φθόριο, που ανήκει στα αμέταλλα, έχει **πολύ υψηλή ηλεκτραρνητικότητα**. Όταν αντιδρούν, το Λίθιο αποδίδει ένα ηλεκτρόνιο από την εξωτερική στοιβάδα σθένους και το Φθόριο προσλαμβάνει ένα ηλεκτρόνιο **συμπληρώνοντας τη στοιβάδα σθένους του**.



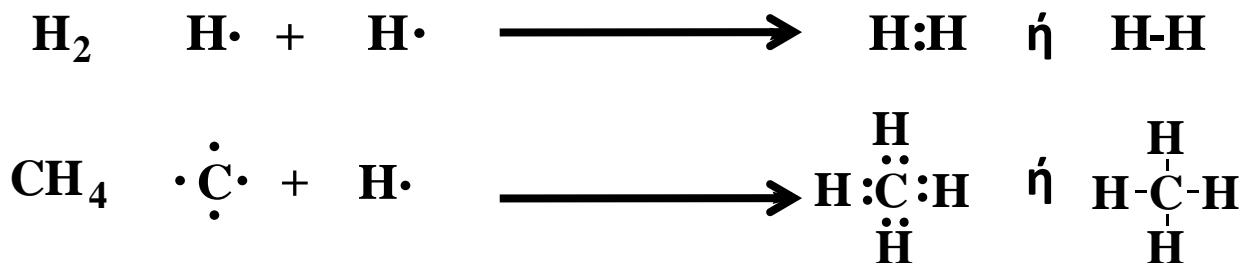
- Σε στερεή κατάσταση, το **Φθορίδιο του Λιθίου** έχει πολύ σταθερή κρυσταλλική δομή όπου το κάθε  $\text{Li}^+$  περιβάλλεται από έξι  $\text{F}^-$  και κάθε  $\text{F}^-$  περιβάλλεται από έξι  $\text{Li}^+$ . **Ισχυρές ελκτικές ηλεκτροστατικές δυνάμεις** αναπτύσσονται μεταξύ των ιόντων αντίθετου φορτίου σταθεροποιώντας τον κρύσταλλο.



# Ομοιοπολικός Δεσμός

Όταν δύο άτομα παραπλήσιας ή ίδιας ηλεκτραρνητικότητας αντιδρούν, αποκτούν τη δομή του πλησιέστερου αδρανούς αερίου τους με αμοιβαία συνεισφορά ηλεκτρονίων σχηματίζοντας ομοιοπολικούς δεσμούς.

## Παραδείγματα:



Σημείωση: Ο άνθρακας που ανήκει στην ομάδα 4 του περιοδικού πίνακα, **χρειάζεται 4 ηλεκτρόνια** για να λάβει τη δομή του **Νέον**. Το υδρογόνο επιτυγχάνει την ηλεκτρονιακή διαμόρφωση του **Ηλίου** με το σχηματισμό απλού δεσμού **δύο ηλεκτρονίων**.

# Πολλαπλοί δεσμοί και ο κανόνας της οκτάδας

Ομοιοπολικοί δεσμοί μεταξύ ατόμων μπορούν να περιλαμβάνουν 2, 4 ή και 6 ηλεκτρόνια. Δεσμοί που περιλαμβάνουν αμοιβαία συνεισφορά 4 ή 6 ηλεκτρονίων ονομάζονται **πολλαπλοί δεσμοί**.

Παράδειγμα:  $N_2$

Κάθε άτομο Αζώτου έχει 5 ηλεκτρόνια στην εξωτερική του στοιβάδα:

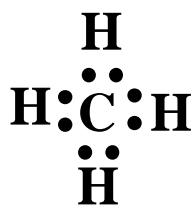


Ο ομοιοπολικός δεσμός στο μόριο του αζώτου περιλαμβάνει 6 ηλεκτρόνια έχοντας το σχηματισμό τριπλού δεσμού :

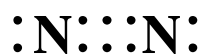


# Ο Κανόνας της Οκταδας

Με την αμοιβαία συνεισφορά 6 ηλεκτρονίων, κάθε άτομο αζώτου αποκτά την ηλεκτρονιακή διαμόρφωση του Νέον έχοντας μια οκτάδα ηλεκτρονίων στην εξωτερική του στοιβάδα. **Η τάση αυτή να συμπληρωθεί η εξωτερική στοιβάδα με 8 ηλεκτρόνια καλείται κανόνας της οκτάδας.**



Μεθάνιο



Άζωτο



Νερό

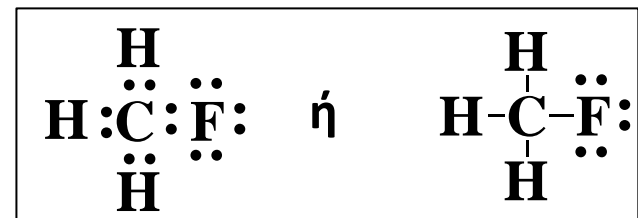
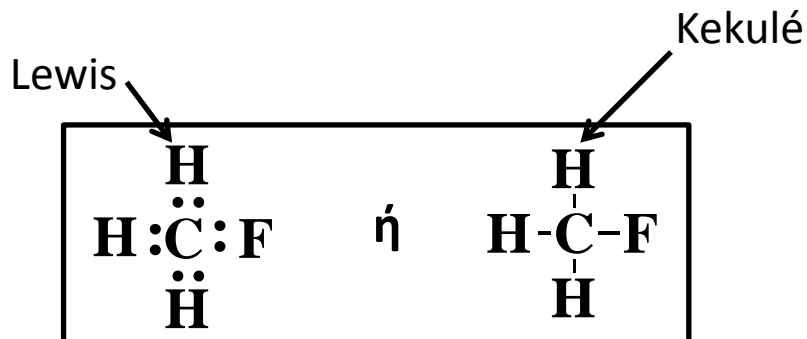


Υδροφθόριο

Οι παραπάνω δομές καλούνται **δομές Lewis** προς τιμήν του G.N. Lewis. Στις δομές Lewis όλα τα ηλεκτρόνια της εξωτερικής στοιβάδας παρουσιάζονται ως τελείες. **Η δομή Lewis ενός ατόμου είναι το χημικό σύμβολο του μαζί με τα ηλεκτρόνια της εξωτερικής του στοιβάδας τα οποία συμβολίζονται με τελείες**

# Φθορομεθάνιο

- Η δομή Lewis για το C H και F είναι:  $\cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot}{\text{C}}}\cdot \quad \cdot\overset{\cdot}{\underset{\cdot\cdot}{\text{F}}}\cdot \quad \text{H}\cdot \quad \text{H}\cdot \quad \text{H}\cdot$
- Υπάρχουν  $4 + 7 + 3 = 14$  ηλεκτρόνια σθένους διαθέσιμα για χημικό δεσμό και για μη δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων
- Οι 4 ομοιοπολικοί δεσμοί του κεντρικού ατόμου άνθρακα **αποτελούν και τα 8 ηλεκτρόνια σθένους**
- Τα υπόλοιπα έξι ηλεκτρόνια είναι **μη-δεσμικά ηλεκτρόνια** γύρω από το Φθόριο.
- **Ο κανόνας της οκτάδας ικανοποιείται τόσο στον άνθρακα όσο και στο φθόριο**



14 ηλεκτρόνια σθένους

# ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ ΚΑΙ ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΟΜΗ

A. ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ: Ο ΚΑΝΟΝΑΣ ΤΗΣ ΣΥΜΠΛΗΡΩΜΕΝΗΣ ΟΚΤΑΔΑΣ

**B. ΔΟΜΕΣ ΚΑΤΑ LEWIS - ΕΞΑΙΡΕΣΕΙΣ ΑΠΟ ΤΟ ΚΑΝΟΝΑ ΤΗΣ ΟΚΤΑΔΑΣ**

Γ. ΤΥΠΙΚΟ ΦΟΡΤΙΟ

Δ. ΘΕΩΡΙΑ ΑΠΩΣΗΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΩΝ ΖΕΥΓΩΝ ΣΤΗ ΣΤΟΙΒΑΔΑ ΣΘΕΝΟΥΣ

Ε. ΔΟΜΕΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΥ

# Απλοί κανόνες για τη σχεδίαση δομών Lewis

1. Οι δομές Lewis δείχνουν τη σύνδεση μεταξύ των ατόμων ή ιόντων σε ένα μόριο χρησιμοποιώντας μόνο τα ηλεκτρόνια σθένους. Τα ηλεκτρόνια σθένους είναι αυτά που βρίσκονται στην εξωτερική στοιβάδα των ατόμων.
2. Για τα στοιχεία των κύριων ομάδων του περιοδικού πίνακα ο αριθμός των ηλεκτρονίων σθένους είναι ο ίδιος με τον αριθμό της ομάδας τους στο περιοδικό πίνακα. Ο άνθρακας για παράδειγμα είναι στην ομάδα IVA και έχει 4 ηλεκτρόνια σθένους. Τα αλογόνα είναι στην ομάδα VIIA και έχουν 7 ηλεκτρόνια. Το Υδρογόνο είναι στην ομάδα IA και έχει ένα ηλεκτρόνιο σθένους

# Απλοί κανόνες για τη σχεδίαση δομών Lewis

3. Εάν η δομή που σχεδιάζουμε είναι αρνητικό ιόν (ανιόν), προσθέτουμε ένα ηλεκτρόνιο για κάθε αρνητικό φορτίο στον αρχικό αριθμό των ηλεκτρονίων σθένους. Εάν η δομή περιλαμβάνει ένα θετικό ιόν (κατιόν), αφαιρούμε ένα ηλεκτρόνιο από τον αρχικό αριθμό ηλεκτρονίων σθένους
4. Στη σχεδίαση μιας δομής Lewis προσπαθούμε να δώσουμε σε κάθε άτομο τη ηλεκτρονιακή διαμόρφωση αδρανούς αερίου. Για να το κάνουμε αυτό σχεδιάζουμε δομές όπου τα άτομα μοιράζονται ηλεκτρόνια για να σχηματίσουν ομοιοπολικούς δεσμούς ή μεταφέρουν ηλεκτρόνια προς το σχηματισμό ιοντικών δεσμών

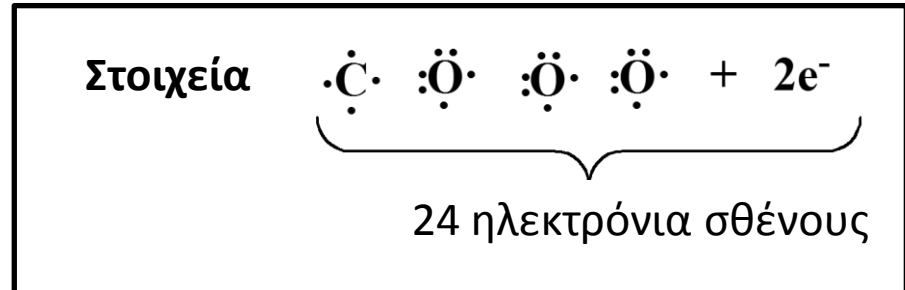
# Δομές Lewis ιόντων

- Η δομή Lewis **ιόντων** σχεδιάζεται από τα άτομα που απαρτίζουν το ιόν προσθέτοντας ή αφαιρώντας ηλεκτρόνια έτσι ώστε να επιτύχουμε το επιθυμητό φορτίο.

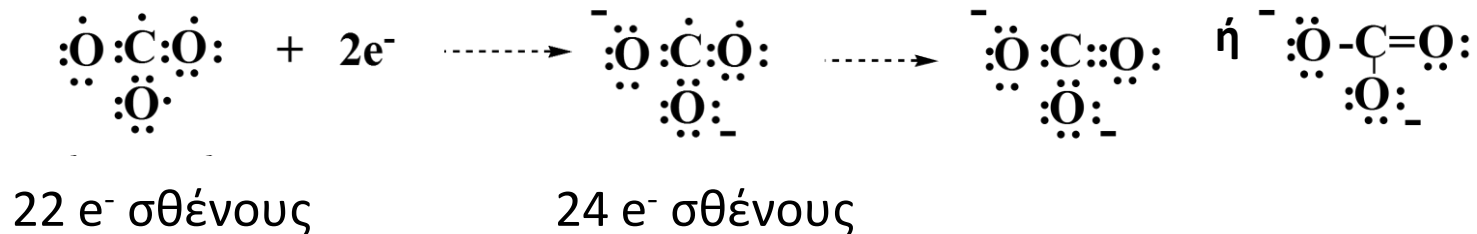


# Ιόν καρβοξυλίου

Ανιόν καρβοξυλίου:  $\text{CO}_3^{2-}$



Σχεδιασμός με βάση το κανόνα της οκτάδας:

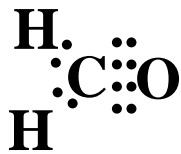


Ο κανόνας της οκτάδας είναι καλός οδηγός για τη πρόβλεψη των ομοιοπολικών δεσμών στις οργανικές ενώσεις που περιέχουν C, N, O, F.

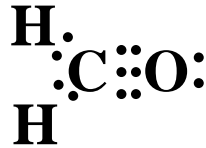
# ΚΟΥΙΖ: Σωστή δομή Lewis??

Ποιά από τις παρακάτω ηλεκτρονιακές διαμορφώσεις είναι η σωστή δομή Lewis για το μόριο  $\text{H}_2\text{CO}$  (πως ονομάζεται??), όπου τα άτομα του H συνδέονται μόνο με τον άνθρακα?

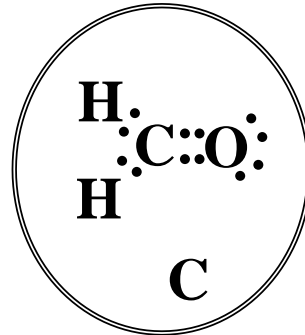
Επιλογές:



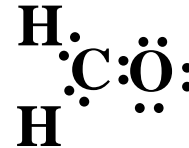
A



B



C



D

**Βήμα 1:** Αριθμός ηλεκτρονίων σθένους  $2 \times 1$  (H) +  $4 \times 1$  (C) +  $6 \times 1$  (O) =  $12 e^-$

**Βήμα 2:** Συμπλήρωση εξωτερικής στοιβάδας  $2 \times 2$  (H) +  $1 \times 8$  (C) +  $1 \times 8$  (O) =  $20 e^-$

**Βήμα 3:** Ηλεκτρόνια μοιράζονται σε δεσμούς (Βήμα 2 – Βήμα 1)  $20 - 12 = 8 e^-$

**Βήμα 4:** Αριθμός δεσμών (Βήμα 3 / 2)  $8 e^- / 2 = 4$  δεσμοί

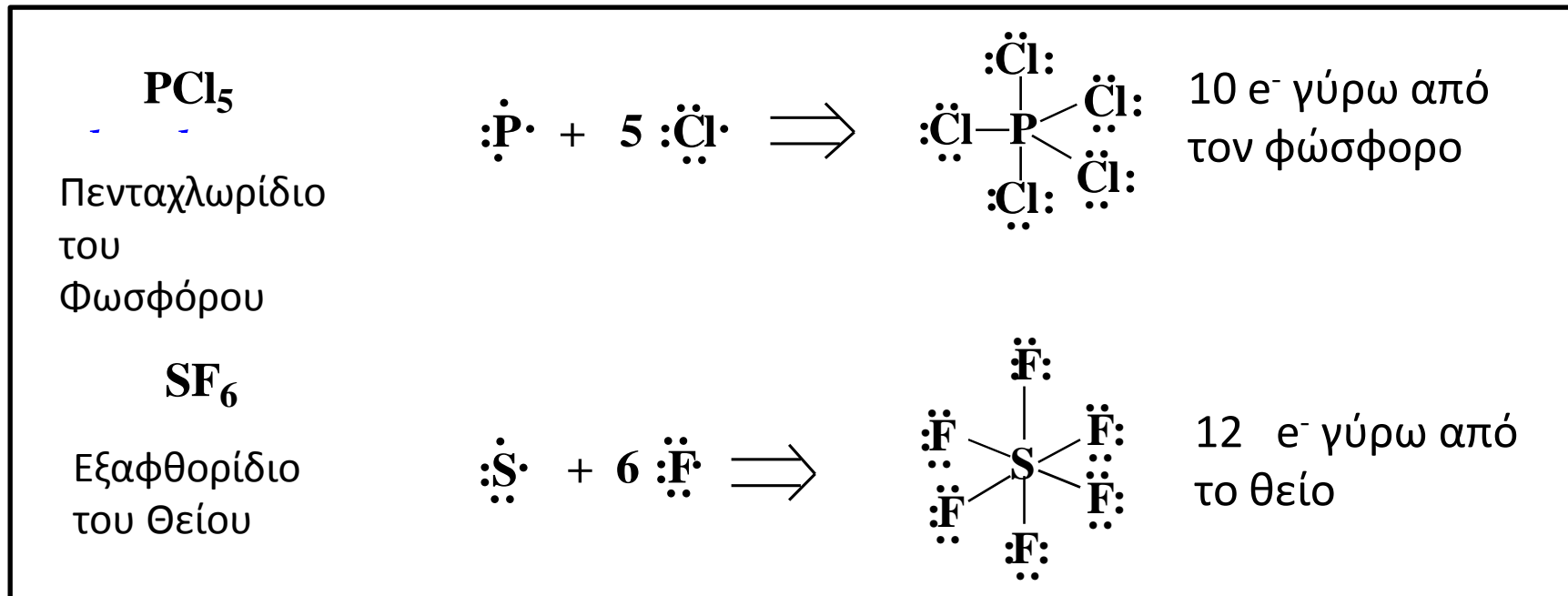
**Βήμα 5:** Αριθμός μη δεσμικών ηλεκτρονίων (Βήμα 1 – Βήμα 3)  $12 - 8 = 4 e^-$  ή 2 ασύζευκτα ζεύγη

# Εξαιρέσεις από το κανόνα της οκτάδας

## Επέκταση στοιβάδας σθένους:

Η βάση του κανόνα της οκτάδας είναι ο μέγιστος αριθμός των ηλεκτρονίων (8) που μπορούν να βρεθούν στο 2<sup>ο</sup> ενεργειακό επίπεδο στα τροχιακά 2s και 2p. Στοιχεία που βρίσκονται στη τρίτη και σε υψηλότερες σειρές του περιοδικού πίνακα δεν περιορίζονται στα 8 ηλεκτρόνια στη στοιβάδα σθένους λόγω και της ύπαρξης των τροχιακών d, f.

### Παραδείγματα :

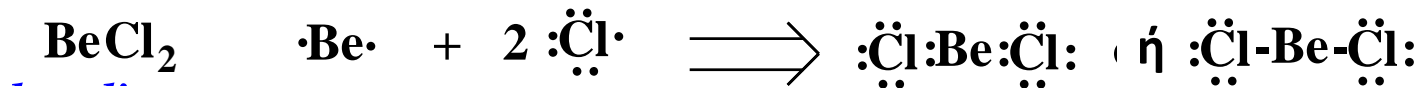


# Εξαιρέσεις από το κανόνα της οκτάδας

## Μόρια με έλλειμμα ηλεκτρονίων:

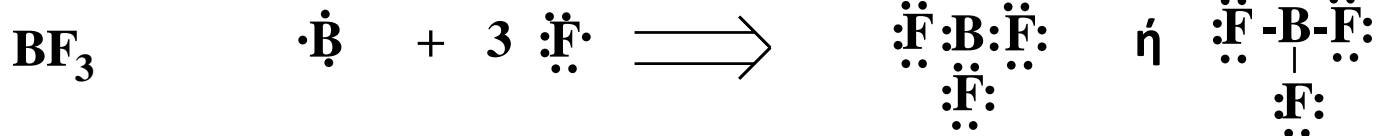
Υπάρχουν πολλές εξαιρέσεις στο κανόνα της οκτάδας μεταξύ στοιχείων από τις πρώτες ομάδες του περιοδικού πίνακα (π.χ Περίοδο 2, Be και B). *Η υψηλή χημική ενεργότητα αυτών των στοιχείων αντικατοπτρίζει και το έλλειμα ηλεκτρονίων τους.*

### Παραδείγματα:



Χλωρίδιο του Βηρυλλίου

Μόνο 4 ηλεκτρόνια στη  
στοιβάδα σθένους του Be

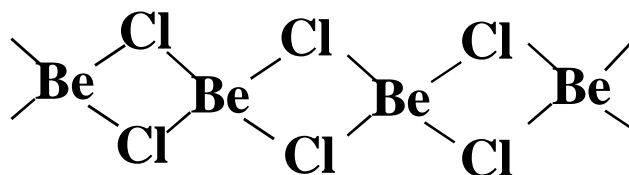


Φθορίδιο του Βορίου

Μόνο 6 ηλεκτρόνια στη  
στοιβάδα σθένους του B

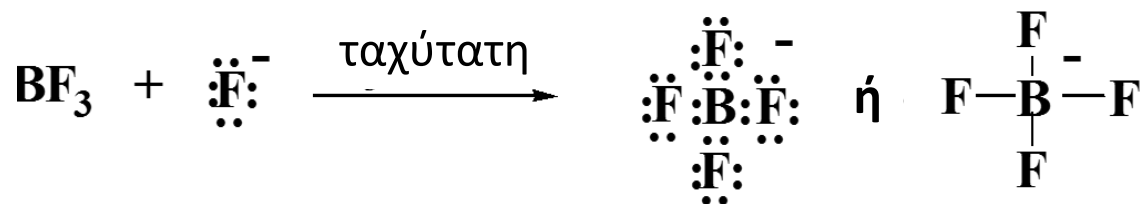
# Μόρια με έλλειμμα ηλεκτρονίων.

Το Χλωρίδιο του Βηρυλλίου υπάρχει ως μονομερές μόνο στην αέρια φάση. Σε στερεή κατάσταση σχηματίζει πολυμερικές αλυσίδες που τελικά ικανοποιούν το κανόνα των οκτάδων



Υπάρχει μια οκτάδα ηλεκτρονίων γύρω από το Be

Επιπλέον το Φθορίδιο του Βορίου αντιδρά ταχύτατα με είδη που μπορούν να συνεισφέρουν ένα ζεύγος ηλεκτρονίων



Υπάρχει μια οκτάδα ηλεκτρονίων γύρω από το Be

# ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ ΚΑΙ ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΟΜΗ

A. ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ: Ο ΚΑΝΟΝΑΣ ΤΗΣ ΣΥΜΠΛΗΡΩΜΕΝΗΣ ΟΚΤΑΔΑΣ

B. ΔΟΜΕΣ ΚΑΤΑ LEWIS - ΕΞΑΙΡΕΣΕΙΣ ΑΠΟ ΤΟ ΚΑΝΟΝΑ ΤΗΣ ΟΚΤΑΔΑΣ

**Γ. ΤΥΠΙΚΟ ΦΟΡΤΙΟ**

Δ. ΘΕΩΡΙΑ ΑΠΩΣΗΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΩΝ ΖΕΥΓΩΝ ΣΤΗ ΣΤΟΙΒΑΔΑ ΣΘΕΝΟΥΣ

E. ΔΟΜΕΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΥ

# Τυπικό Φορτίο

- Είναι δυνατό να προβλέψουμε το θετικό ή αρνητικό φορτίο των ατόμων στις δομές Lewis. **Αυτό είναι σημαντικό γιατί με βάση τα τυπικά φορτία μπορούμε να προβλέψουμε τη χημική δραστηριότητα των μορίων.** Το άθροισμα όλων των τυπικών φορτίων θα πρέπει να είναι ίσο με το συνολικό φορτίο στη δομή Lewis.
- Το τυπικό φορτίο ενός ατόμου υπολογίζεται αφαιρώντας τον αριθμό των ηλεκτρονίων που ανήκουν στο άτομο στη δεσμική του κατάσταση από τον αριθμό των ηλεκτρονίων στη ζώνη σθένους όταν το άτομο είναι ελεύθερο

# Ηλεκτρόνια σθένους στη δεσμική κατάσταση

- Τα ηλεκτρόνια στον ομοιοπολικό δεσμό μοιράζονται εξίσου στα δύο άτομα που συμμετέχουν στο δεσμό.
- Μη δεσμικά ηλεκτρόνια αποδίδονται εξ' ολοκλήρου στο άτομο στα οποίο βρίσκονται

*Ο συνολικός αριθμός των ηλεκτρονίων σθένους που αποδίδονται σε ένα άτομο στη δεσμική του κατάσταση είναι το μισό του αριθμού των ηλεκτρονίων στους ομοιοπολικούς δεσμούς συν όλα τα ασύζευκτα ηλεκτρόνια του*



# Παραδείγματα τυπικού φορτίου

CH <sub>4</sub>	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \text{H}:\ddot{\text{C}}:\text{H} \\ \text{H} \end{array}$	Άτομο	Ηλεκτρόνια Σθένους		
			Ελεύθερο ο Άτομο	Δεσμική Κατάσταση	Τυπικό φορτίο
		H	1	- 1	0
		C	4	- 4	0

NH <sub>3</sub>	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \text{H}:\ddot{\text{N}}:\text{H} \\ \text{H} \end{array}$	Άτομο	Ηλεκτρόνια Σθένους		
			Ελεύθερο Άτομο	Δεσμική Κατάσταση	Τυπικό φορτίο
		H	1	- 1	0
		N	5	- (3 + 2)	0

# Παραδείγματα τυπικού φορτίου

$\text{NH}_4^+$	$  \begin{array}{c}  \text{H}^+ \\  \text{H}:\ddot{\text{N}}:\text{H} \\  \ddot{\text{H}}  \end{array}  $	Άτομο	<b>Ηλεκτρόνια Σθένους</b>			
			Ελεύθερο Άτομο	Δεσμική Κατάσταση	Τυπικό φορτίο	
	<b>H</b>		<b>1</b>	<b>-</b>	<b>1</b>	<b>0</b>
	<b>N</b>		<b>5</b>	<b>-</b>	<b>4</b>	<b>+1</b>

$\text{CO}_3^{2-}$	$  \begin{array}{c}  :\ddot{\text{O}}: \\  :\ddot{\text{O}}:\text{C}:\ddot{\text{O}}:  \end{array}  $	Άτομο	<b>Ηλεκτρόνια Σθένους</b>			
			Ελεύθερο Άτομο	Δεσμική Κατάσταση	Τυπικό φορτίο	
	<b>C</b>		<b>4</b>	<b>-</b>	<b>4</b>	<b>0</b>
	<b>O</b>		<b>6</b>	<b>-</b>	<b>6</b>	<b>0</b>
	<b>2 O</b>		<b>6</b>	<b>-</b>	<b>(6 + 1)</b>	<b>-1</b>

# ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ ΚΑΙ ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΟΜΗ

A. ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ: Ο ΚΑΝΟΝΑΣ ΤΗΣ ΣΥΜΠΛΗΡΩΜΕΝΗΣ ΟΚΤΑΔΑΣ

B. ΔΟΜΕΣ ΚΑΤΑ LEWIS - ΕΞΑΙΡΕΣΕΙΣ ΑΠΟ ΤΟ ΚΑΝΟΝΑ ΤΗΣ ΟΚΤΑΔΑΣ

Γ. ΤΥΠΙΚΟ ΦΟΡΤΙΟ

**Δ. ΘΕΩΡΙΑ ΑΠΩΣΗΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΩΝ ΖΕΥΓΩΝ ΣΤΗ ΣΤΟΙΒΑΔΑ ΣΘΕΝΟΥΣ**

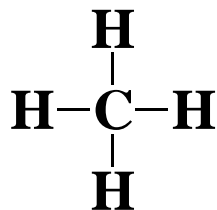
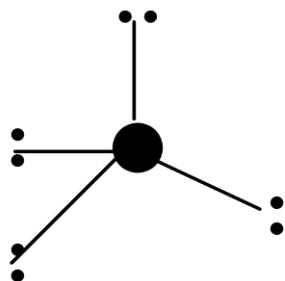
E. ΔΟΜΕΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΥ

# Θεωρία Άπωσης Ηλεκτρονιακών Ζευγών στη Στοιβάδα Σθένους.

- Η θεωρία VSEPR παρέχει έναν απλό τρόπο πρόβλεψης μοριακής γεωμετρίας γύρω από ένα κεντρικό άτομο. Οι προβλέψεις της είναι συμβατές με τη θεωρία υβριδισμένων τροχιακών.
- **Βασικά σημεία της θεωρίας VESPR:**
  - A. Τα μόρια και τα ιόντα μπορούν να αναλυθούν σε ένα κεντρικό άτομο που συνδέεται ομοιοπολικά με 2 ή και περισσότερα άτομα ή ομάδες
  - B. Όλα τα ζεύγη των ηλεκτρονίων γύρω από το κεντρικό άτομο κατατάσσονται σε συζευγμένα και ασύζευκτα
  - C. Λόγω των απώσεων e-e, τα ζεύγη των ηλεκτρονίων τείνουν να παραμένουν μεταξύ τους στη μακρύτερη δυνατή απόσταση. Απώσεις λόγω ασύζευκτων ζευγών ηλεκτρονίων είναι ισχυρότερες από τις απώσεις των συζευγμένων
  - D. Η τελική γεωμετρία έχει όλα τα ζεύγη των ηλεκτρονίων τοποθετημένα κατά τέτοιο τρόπο ώστε να ελαχιστοποιούνται οι απώσεις μεταξύ των ζευγών

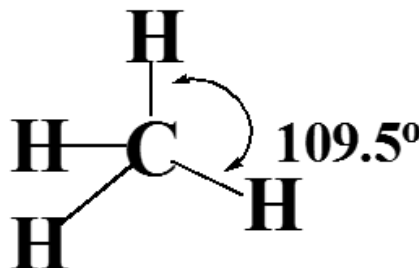
# Παραδείγματα

Μεθάνιο



Υπάρχουν τέσσερα ζεύγη δεσμικών ηλεκτρονίων γύρω από το κεντρικό άτομο του άνθρακα.

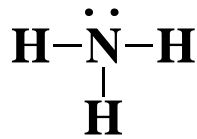
Ο μέγιστος διαχωρισμός των 4 ζευγών επιτυγχάνεται με την τετραεδρική γεωμετρία όπου τα 4 ζεύγη καταλαμβάνουν τις γωνίες ενός τετραέδρου



Ιδανική  
τετραεδρική  
γεωμετρία

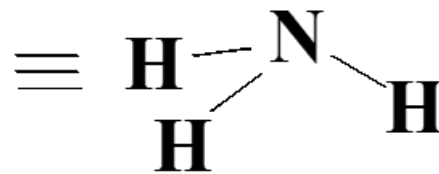
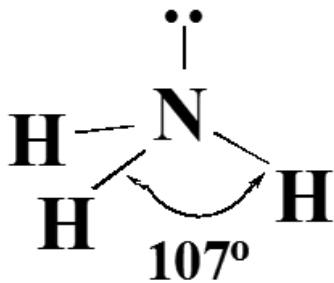
# Η σημασία του ασύζευκτου ζεύγους

Αμμωνία



Η γεωμετρία της αμμωνίας συχνά περιγράφεται ως τριγωνική πυραμίδα. Αυτή η δομή προβλέπεται από τη θεωρία VSEPR

Η θεωρία VSEPR προβλέπει τετραεδρική γεωμετρία γύρω από το άζωτο



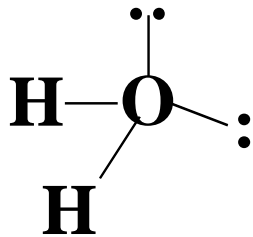
Τριγωνική Πυραμίδα

Η πραγματική γεωμετρία είναι *παραμορφωμένο τετράεδρο* με μικρή συμπίεση των δεσμών N-H έτσι ώστε να είναι λίγο μεγαλύτερη η απόσταση του ασύζευκτου ζεύγους ηλεκτρονίων με τα υπόλοιπα ζεύγη.

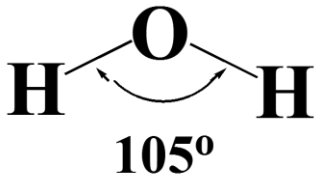
# Γεωμετρία Νερού: Δυο ασύζευκτα ζεύγη ηλεκτρονίου

**H<sub>2</sub>O** Το κεντρικό άτομο στο μόριο του νερού είναι το οξυγόνο

Υπάρχουν τέσσερα ζεύγη ηλεκτρονίων γύρω από το κεντρικό άτομο. Δύο συζευγμένα και δυο ασύζευκτα



Η θεωρία VSEPR προβλέπει τα 4 ζεύγη να κατευθύνονται στις γωνίες τετραέδρου ώστε να έχουμε μέγιστο διαχωρισμό ζευγών



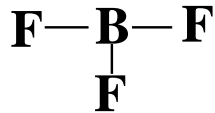
Η πραγματική γεωμετρία είναι γωνιακή με τη γωνία δεσμού H-O-H συμπιεσμένη στις 105° έτσι ώστε να είναι λίγο μεγαλύτερη η απόσταση των ασύζευκτων ζευγών ηλεκτρονίων με τα υπόλοιπα ζεύγη

Γωνιακή ή κεκαμμένη

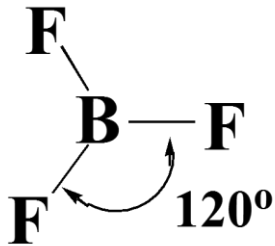
# Το μόριο $\text{BF}_3$ : Τρία συζευγμένα ζεύγη ηλεκτρονίου



Το μόριο  $\text{BF}_3$  έχει δομή επίπεδη τριγωνική με βάση τη θεωρία VSEPR



Υπάρχουν τρία ζεύγη συζευγμένων ηλεκτρονίων στη ζώνη σθένους γύρω από το κεντρικό άτομο του βορίου



Η θεωρία VSEPR προβλέπει τα τρία ζεύγη ηλεκτρονίων να προεκτείνονται στις γωνίες ισοσκελούς τριγώνου για μέγιστο διαχωρισμό μεταξύ των ζευγών ηλεκτρονίου

Επίπεδη τριγωνική



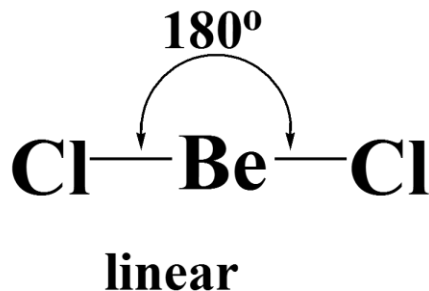
# Το μόριο $\text{BeCl}_2$ : Δύο συζευγμένα ζεύγη ηλεκτρονίου



Το μόριο  $\text{BeCl}_2$  έχει δομή γραμμική με βάση τη θεωρία VSEPR



Υπάρχουν δύο ζεύγη συζευγμένων ηλεκτρονίων στη ζώνη σθένους γύρω από το κεντρικό άτομο του βηρυλλίου



Η θεωρία VSEPR προβλέπει τα δυο ζεύγη ηλεκτρονίων να προεκτείνονται σε αντίθετες κατευθύνσεις για μέγιστο διαχωρισμό μεταξύ των ζευγών ηλεκτρονίου

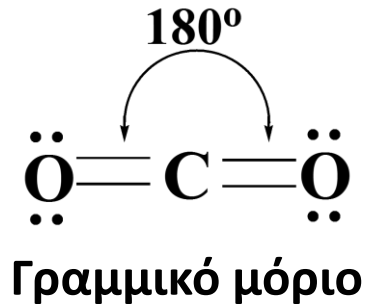
Γραμμικό μόριο

# Πολλαπλοί δεσμοί: Σετ ηλεκτρονίων

Η θεωρία VSEPR προβλέπει επίσης τη γεωμετρία μορίων γύρω από ένα κεντρικό άτομο που έχει δεσμούς 4 και 6 ηλεκτρονίων (διπλοί και τριπλοί δεσμοί). Οι πολλαπλοί δεσμοί αντιμετωπίζονται ως απλό σετ ηλεκτρονίων. Η προτεινόμενη γεωμετρία και σε αυτή τη περίπτωση βασίζεται στο μέγιστο διαχωρισμό σετ και ζευγών ηλεκτρονίων.

Διοξείδιο του άνθρακα       $\text{CO}_2$       Δύο σετ

Το διοξείδιο του άνθρακα έχει 16 ηλεκτρόνια στη στοιβάδα σθένους. Για να πληρείται ο κανόνας της οκτάδας, 2 διπλοί δεσμοί  $\text{C}=\text{O}$  απαιτούνται



Η θεωρία VSEPR θεωρεί κάθε ένα δεσμό 4 ηλεκτρονίων σαν ένα σετ ηλεκτρονίων. Μέγιστος διαχωρισμός μεταξύ των 2 σετ γύρω από το κεντρικό άνθρακα επιτυγχάνεται με γραμμική γεωμετρία

# Σύνοψη θεωρίας VSEPR

## Δομές μορίων και ιόντων από VSEPR θεωρία

Αριθμός ζευγών ηλεκτρονίων  
στο κεντρικό άτομο

Δεσμικά

Μη Δεσμικά

Σύνολο

Υβριδισμός  
στο κεντρικό  
άτομο

Δομή μορίου  
ή ιόντος

Παραδείγματα

2

0

2

$sp$

Γραμμική

$\text{BeH}_2$

3

0

3

$sp^2$

Επίπεδη τριγωνική

$\text{BF}_3, \text{CH}_3^+$

4

0

4

$sp^3$

Τετραεδρική

$\text{CH}_4, \text{NH}_4^+$

3

1

4

$\sim sp^3$

Τριγωνική πυραμίδα

$\text{NH}_3, \text{CH}_3^-$

2

2 (1)

4 (3)

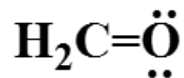
$\sim sp^3$

Γωνιακή

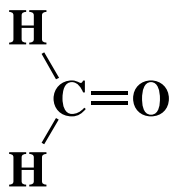
$\text{H}_2\text{O}$

# Κουίζ

Χρησιμοποιήστε τη θεωρία VSEPR για να προβλέψεται τη γεωμετρία γύρω από το κεντρικό άτομο άνθρακα στα παρακάτω μόρια / ιόντα



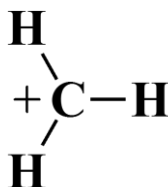
Φορμαλδεΐδη



1 σετ δεσμικών ηλεκτρονίων (διπλός δεσμός) και 2 ζεύγη ηλεκτρονίων –  
επίπεδη τριγωνική



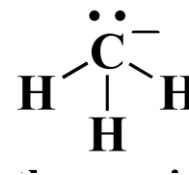
Μέθυλ-κατιόν



3 ζεύγη δεσμικών ηλεκτρονίων –  
επίπεδη τριγωνική



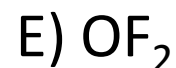
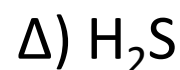
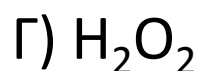
Μέθυλ-ανιόν



3 ζεύγη δεσμικών ηλεκτρονίων και ένα ζεύγος ασύζευκτων –  
τριγωνική πυραμίδα

# Κουίζ

Ποιό από τα παρακάτω μόρια είναι γραμμικό? (Να γράψετε τις δομές Lewis πριν αποφασίσετε)



Σωστό το (B) έχει 1 σεν και ένα ζεύγος συζευγμένων ηλεκτρονίων

Το (A), (Γ), (Δ), (E) Γωνιακή (έχουν 2 συζευγμένα & 2 ασύζευκτα ζεύγη)

# ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ ΚΑΙ ΜΟΡΙΑΚΗ ΔΟΜΗ

A. ΧΗΜΙΚΟΙ ΔΕΣΜΟΙ: Ο ΚΑΝΟΝΑΣ ΤΗΣ ΣΥΜΠΛΗΡΩΜΕΝΗΣ ΟΚΤΑΔΑΣ

B. ΔΟΜΕΣ ΚΑΤΑ LEWIS - ΕΞΑΙΡΕΣΕΙΣ ΑΠΟ ΤΟ ΚΑΝΟΝΑ ΤΗΣ ΟΚΤΑΔΑΣ

Γ. ΤΥΠΙΚΟ ΦΟΡΤΙΟ

Δ. ΘΕΩΡΙΑ ΑΠΩΣΗΣ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑΚΩΝ ΖΕΥΓΩΝ ΣΤΗ ΣΤΟΙΒΑΔΑ ΣΘΕΝΟΥΣ

**E. ΔΟΜΕΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΥ**

# Δομές Συντονισμού

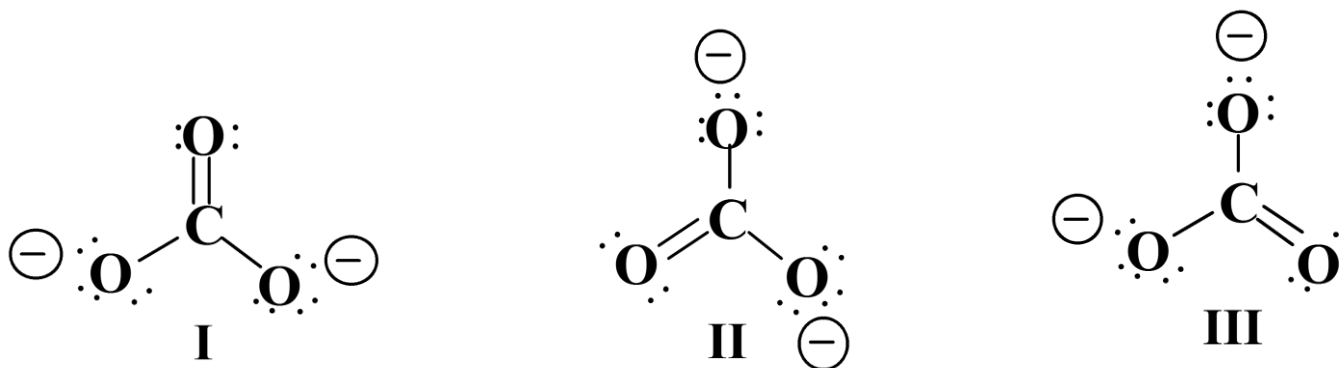


Ανθρακικό ανιόν

24 ηλεκτρόνια σθένους

**ΔΟΜΕΣ LEWIS ΓΙΑ ΤΟ ΑΝΘΡΑΚΙΚΟ ΑΝΙΟΝ**

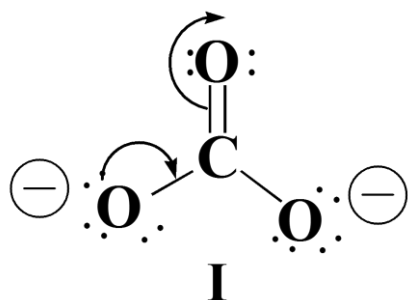
**ΔΟΜΕΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΥ**



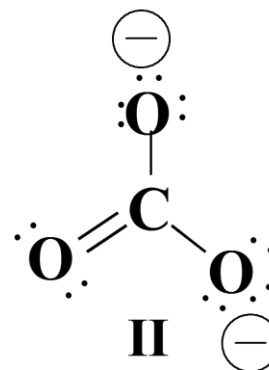
**Τρεις ισοδύναμες δομές Lewis**

# Δομές Συντονισμού

Οι τρεις δομές αναπαράγονται με μετακίνηση ζευγών ηλεκτρονίων



γίνεται



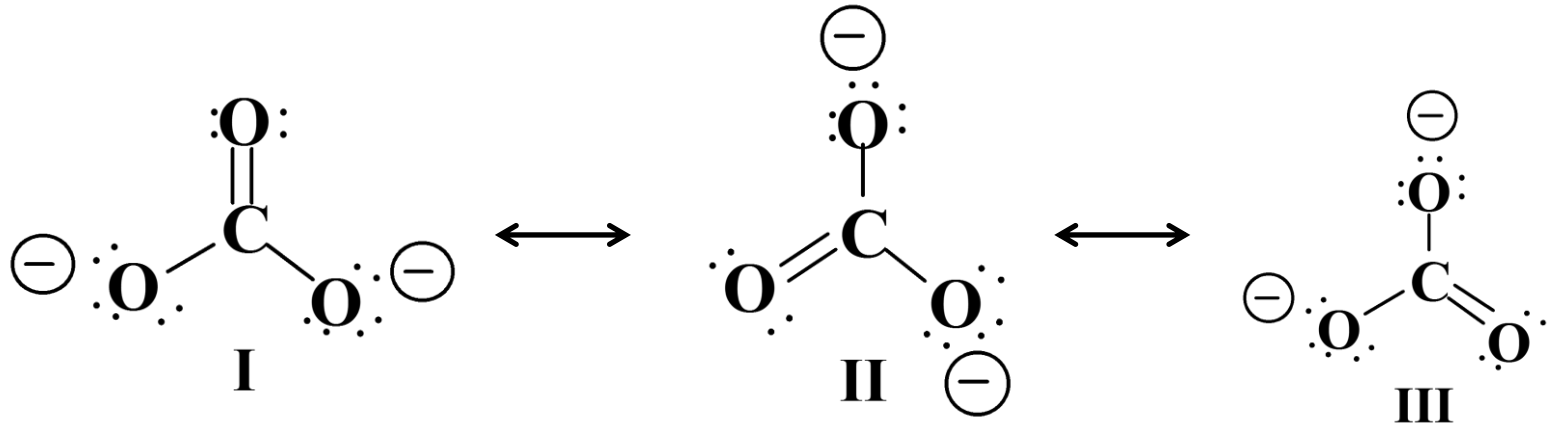
Ο κανόνας της οκτάδας  
πρέπει να τηρείται

Το τυπικό φορτίο  
ακολουθεί αυτόματα

Οι εναλλακτικές δομές που προκύπτουν με απλή μετακίνηση ζευγών ηλεκτρονίων ονομάζονται δομές συντονισμού.



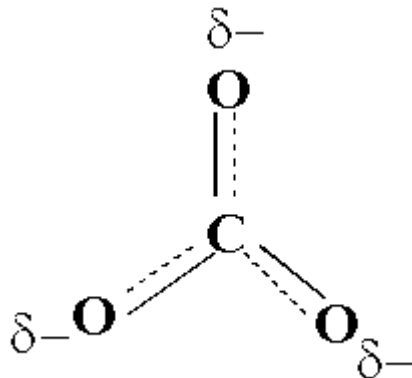
# Δομές Συντονισμού



Το διπλό βέλος χρησιμοποιείται για να υποδείξει δομές συντονισμού που συνεισφέρουν στο υβρίδιο

**Η πραγματική ηλεκτρονιακή δομή του ανθρακικού ανιόντος είναι ένα υβρίδιο των τριών ισοδύναμων δομών**

Υβρίδιο



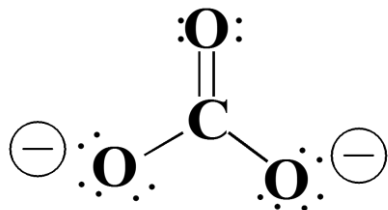
**Υπάρχουν 3 ισοδύναμοι δεσμοί στο ανθρακικό ανιόν**

**Κάθε δεσμός C-O είναι δεσμός 1 και 1/3**

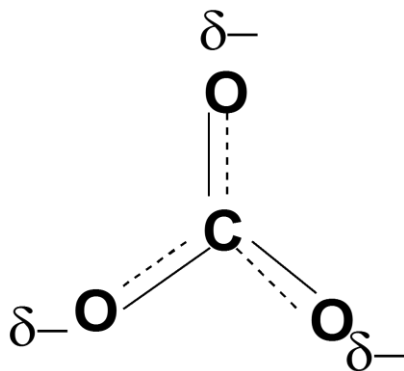
**Κάθε O έχει τυπικό φορτίο -2/3**

# Δομές Ανθρακικού Ιόντος

Οι δομές Lewis δείχνουν δομές με δεσμούς C-O 2 τύπων: 2 απλούς και ένα διπλό



Με βάση μετρήσεις ακτίνων Χ θα έπρεπε ο απλός δεσμός να έχει μεγαλύτερο μήκος από το διπλό: 1.43 Å vs 1.20 Å



Από πειράματα έχει βρεθεί ότι όλοι οι δεσμοί C-O στο ανθρακικό ιόν έχουν το ίδιο μήκος: 1.28 Å

Αυτή η ισοδυναμία στο μήκος και ισχύς των δεσμών ερμηνεύεται με βάση τη θεωρία συντονισμού

# Θεωρία Συντονισμού

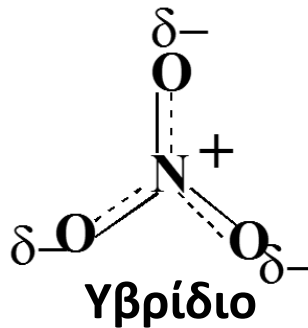
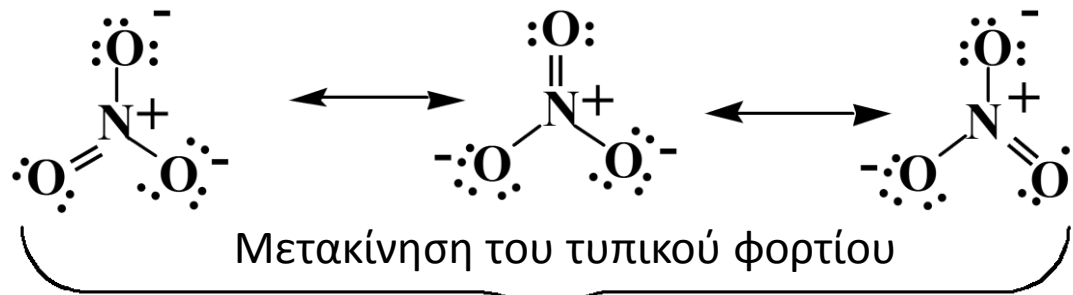
Οποτεδήποτε ένα μόριο μπορεί να αναπαρασταθεί με 2 ή περισσότερες δομές Lewis που διαφέρουν μόνο ως προς τη θέση των ηλεκτρονίων:

1. Μία μόνο απλή δομή συντονισμού δεν αποτελεί σωστή αναπαράσταση του μορίου και δεν θα ανταποκρίνεται στις ιδιότητες του μορίου
2. Το πραγματικό μόριο ή ιόν θα αποτυπώνεται καλύτερα από ένα υβρίδιο όλων των δομών συντονισμού

# Παράδειγμα

Γράψτε τις δομές συντονισμού και το τελικό υβρίδιο για το Νιτρικό Ιόν  $\text{NO}_3^-$

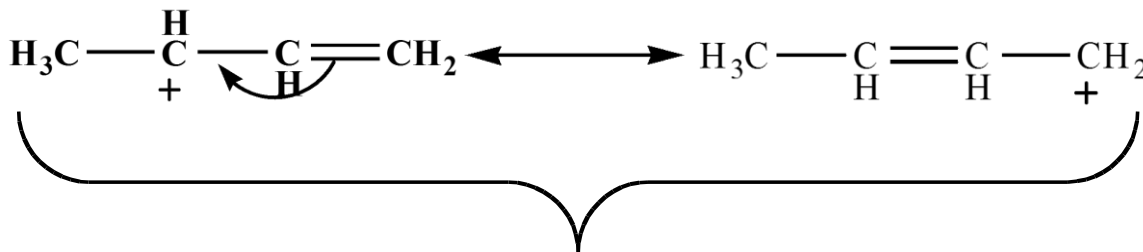
Οι δομές Lewis που ικανοποιούν το κανόνα της οκτάδας



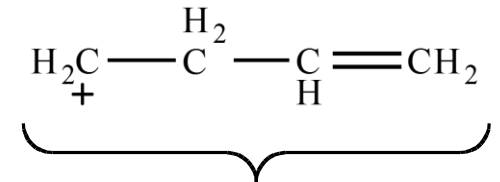
Υπάρχουν 3 ισοδύναμοι δεσμοί N-O και κάθε οξυγόνο έχει φορτίο  $-2/3$

# Περίληψη Κανόνων Δομών Συντονισμού

- Οι δομές συντονισμού υπάρχουν μόνο στο χαρτί
- Στις δομές συντονισμού επιτρέπεται να μετακινήσουμε μόνο ηλεκτρόνια



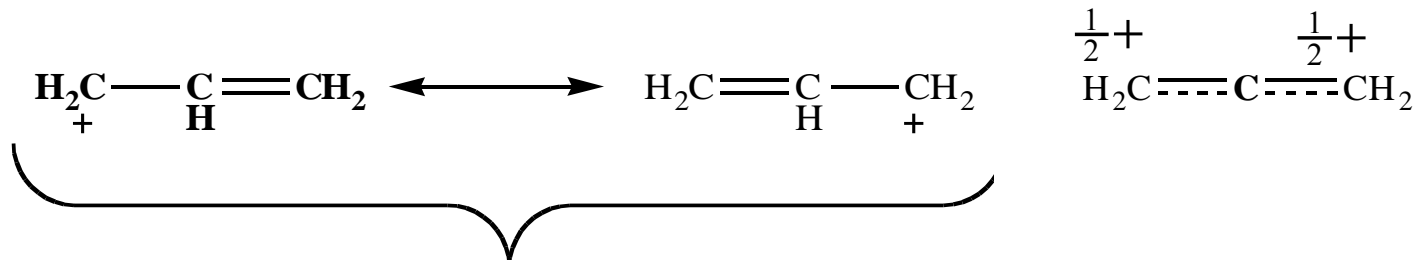
Αυτές οι δύο είναι δομές συντονισμού γιατί προκύπτουν μόνο από μετακίνηση ηλεκτρονίων



Αυτή δεν είναι γιατί εκτός από μετακίνηση ηλεκτρονίων έχουμε και μετακίνηση υδρογόνου

# Περίληψη Κανόνων Δομών Συντονισμού

- Όλες οι δομές συντονισμού πρέπει να αντιστοιχούν σε σωστές δομές Lewis
- Η ενέργεια του πραγματικού μορίου (υβριδίου) πρέπει να είναι χαμηλότερη από την ενέργεια που μπορεί να υπολογιστεί από τις επιμέρους δομές συντονισμού
- Ισοδύναμες δομές συντονισμού συνεισφέρουν εξίσου στο σχηματισμό του υβριδίου και το σύστημα που προκύπτει από αυτές οδηγεί είναι ιδιαίτερα σταθερό

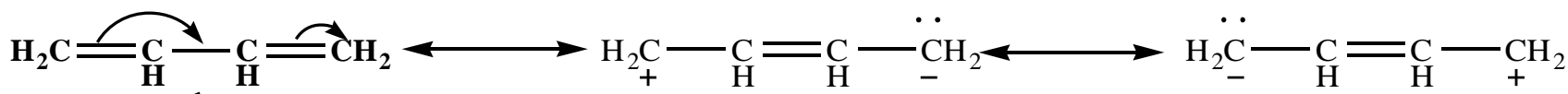


Δομές συντονισμού που συνεισφέρουν

Υβρίδιο Συντονισμού

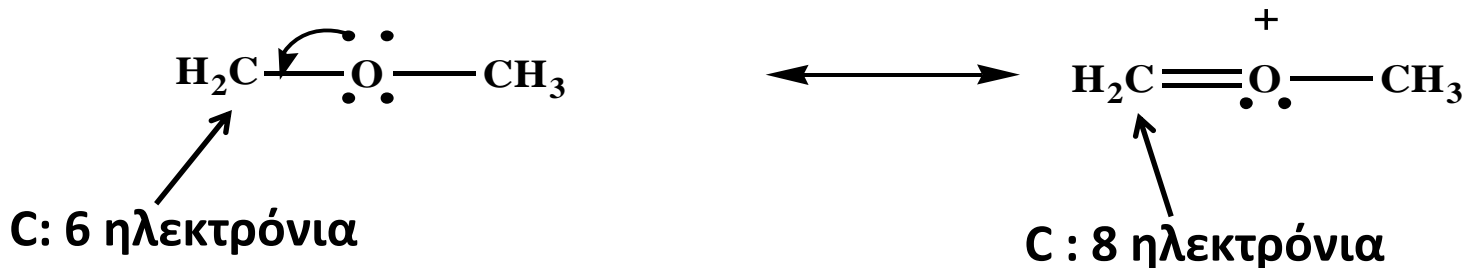
- Όσο πιο σταθερή είναι μια δομή τόσο μεγαλύτερη είναι η συνεισφορά της στο τελικό υβρίδιο:

- Όσο περισσότερους ομοιοπολικούς δεσμούς έχει μια ένωση, τόσο σταθερότερη είναι.

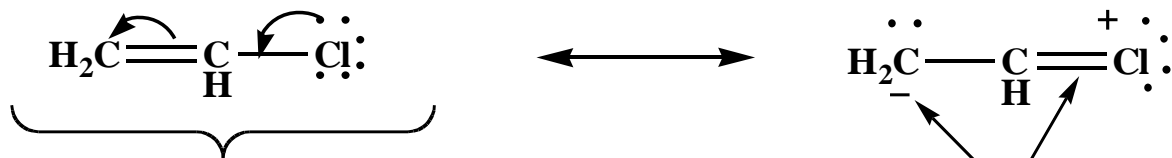


Πιο σταθερή : περιέχει τους περισσότερους ομοιοπολικούς δεσμούς

- Δομές στις οποίες όλα τα άτομα έχουν συμπληρωμένη την εξωτερική τους στοιβάδα είναι ιδιαίτερα σταθερές και έχουν μεγάλη συνεισφορά στο τελικό υβρίδιο



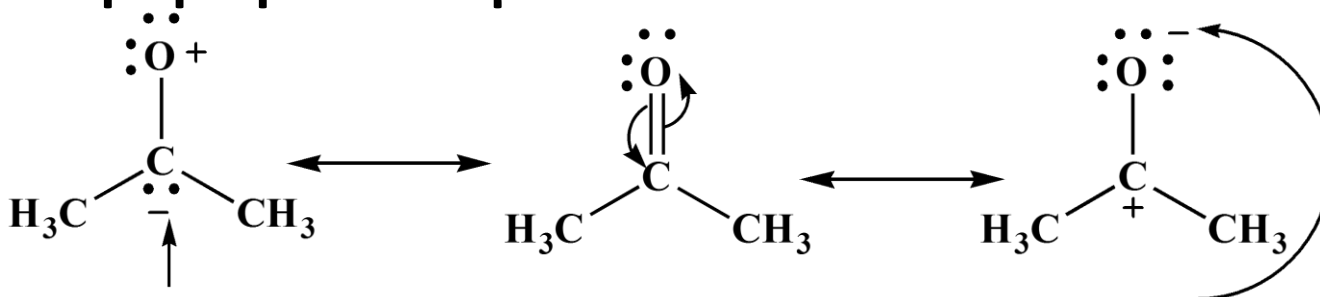
### c. Ο διαχωρισμός φορτίου ελαττώνει τη σταθερότητα



Κανένας διαχωρισμός φορτίου –  
μεγιστη σταθερότητα

Διαχωρισμός φορτίου – όχι  
ιδιαίτερα σταθερή δομή

### d. Δομές συντονισμού με αρνητικό φορτίο σε υψηλά ηλεκτραρνητικά άτομα είναι σταθερότερες από δομές με αρνητικό φορτίο σε λιγότερο ηλεκτραρνητικά ή μη ηλεκτραρνητικά άτομα



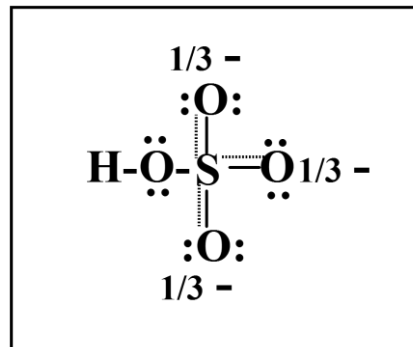
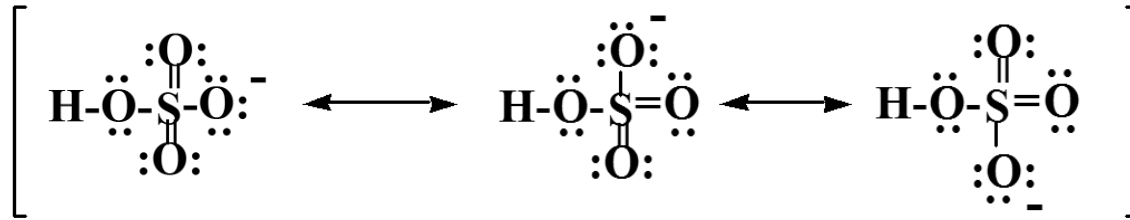
Αρνητικό φορτίο σε μη  
ηλεκτραρνητικό άτομο – όχι  
ιδιαίτερα σταθερή δομή

Αρνητικό φορτίο σε  
ηλεκτραρνητικό άτομο –  
σταθερή δομή συντονισμού



# Κουίζ

Να σχεδιάσετε τις δομές συντονισμού και το υβρίδιο τους για το όξινο θειϊκό ανιόν,  $\text{HSO}_4^-$



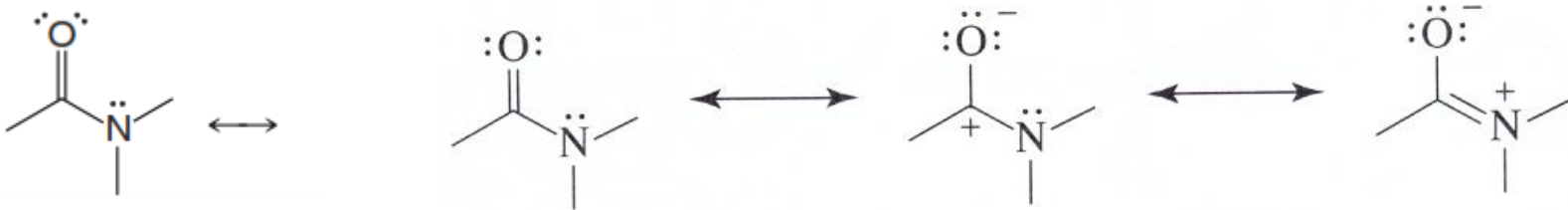
# Κουίζ

Γραψτέ όλες τις πιθανές δομές συντονισμού για τα παρακάτω μόρια:

3 δομές συντονισμού



3 δομές συντονισμού



Τέλος ενότητας

# Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών, . Επίκουρος καθηγητής Ελευθέριος Αμανατίδης, «Οργανική Χημεία». Έκδοση: 1.0. Πάτρα 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: <https://eclass.upatras.gr/courses/CMNG2116/>



# Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



# Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά, Μη Εμπορική Χρήση Παρόμοια Διανομή 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>

Ως **Μη Εμπορική** ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου, για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό όφελος (π.χ. διαφημίσεις) από την προβολή του έργου σε διαδικτυακό τόπο

Ο δικαιούχος μπορεί να παρέχει στον αδειοδόχο ξεχωριστή άδεια να χρησιμοποιεί το έργο για εμπορική χρήση, εφόσον αυτό του ζητηθεί.