



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS

Τμήμα Μηχανικών
Περιβάλλοντος,
Πολυτεχνική Σχολή

Οργανική Χημεία

1^η Ενότητα

Γαλάνη Απ. Αγγελική, Χημικός PhD
Εργαστηριακό Διδακτικό Προσωπικό, (Ε.ΔΙ.Π.)

- Σπουδαιότητα Οργανικής Χημείας
- Αντικείμενο μελέτης Οργανικής Χημείας
- Ατομική δομή και τροχιακά
- Περιγραφή ομοιοπολικών δεσμών:
 - Θεωρία δεσμού σθένους
 - Θεωρία μοριακών τροχιακών
- Υβριδισμός
- Δομή μεθανίου και τροχιακά sp^3
- Δομή του αιθανίου
- Δομή του αιθυλενίου και τροχιακά sp^2
- Δομή του ακετυλενίου και τροχιακά sp
- Δείκτης LD_{50} – Άμεση χημική τοξικότητα.



Γιατί είναι σημαντική η μελέτη της Οργανικής Χημείας;

Οπουδήποτε κανείς κοιτάξει γύρω του, θα βρει τις απαντήσεις σε αυτό το ερώτημα.

Όλοι οι ζωντανοί οργανισμοί αποτελούνται από οργανικά μόρια.

Τα τρόφιμα, τα φάρμακα, τα ρούχα μας όλα αποτελούνται από οργανικά μόρια.




ΧΗΜΙΚΗ ΒΙΟΛΟΓΙΑ:

Εμπλέκει τις επιστήμες της Χημείας και της Βιολογίας. Εφαρμόζει χημικές τεχνικές και εργαλεία ή και χρησιμοποιεί μόρια που παράγονται με τη συνθετική χημεία, για να μελετήσει και να επηρεάσει τα βιολογικά συστήματα. Βρίσκει ιδιαίτερη εφαρμογή στη Φαρμακευτική Χημεία.

<http://www.msc.chembiol.chem.upatras.gr/el/>



Ασύμμετρη κατάλυση: Είναι τύπος κατάλυσης στον οποίο ένας οπτικά ενεργός καταλύτης κατευθύνει τον σχηματισμό μιας χειρόμορφης ένωσης έτσι ώστε να ευνοείται ο σχηματισμός ενός συγκεκριμένου στερεοϊσομερούς.



Χημική βιολογία: Περιλαμβάνει χρήση τεχνικών, εργαλείων και μεθόδων χημείας στη μελέτη βιολογικών συστημάτων. Είναι όμως σημαντικό να μην συγχέεται με τη βιοχημεία.

- Η βιοχημεία μελετά τη χημική πλευρά των βιολογικών οργανισμών. Μελετά τις χημικές αντιδράσεις που συμβαίνουν μέσα στους οργανισμούς και τη μοριακή σύνθεση των ενώσεων που βρίσκονται σε οργανισμούς.
- Η χημική βιολογία από την άλλη πλευρά περιλαμβάνει την μελέτη βιολογικών συστημάτων, όταν χρησιμοποιούνται χημικές ουσίες σε αυτά. Για παράδειγμα, μπορούμε να προσθέσουμε ένα χημικό ή ειδικά σχεδιασμένο δείγμα μορίων σε έναν ιστό ή κύτταρο και να δούμε τι επιπτώσεις έχει. Η χημική βιολογία συνήθως περιλαμβάνει μικρότερα μόρια από τη βιοχημεία, που εξετάζει μεγάλα μόρια όπως νουκλεϊνικά οξέα και πρωτεΐνες. ☉

Π.χ. η βιολογική χημεία εμπλέκεται στη χρήση βλαστικών κυττάρων στην κοσμετολογία.



- Παλαιότερα πίστευαν ότι οι οργανικές ενώσεις είχαν ζωτική δύναμη, προέρχονταν από ζωντανούς οργανισμούς και δεν μπορούσαν να παρασκευαστούν στο εργαστήριο «Βιταλιστική θεωρία».
- Όταν ανακαλύφθηκε πως ακόμη και το σαπούνι παρασκευάζεται στο εργαστήριο από αντίδραση με ζωικό λίπος και διαχωρίζεται σε λιπαρά οξέα και ότι από ανόργανο άλας μπορούμε να πάρουμε τη γνωστή ένωση ουρία, η βιταλιστική θεωρία εγκαταλείφθηκε.



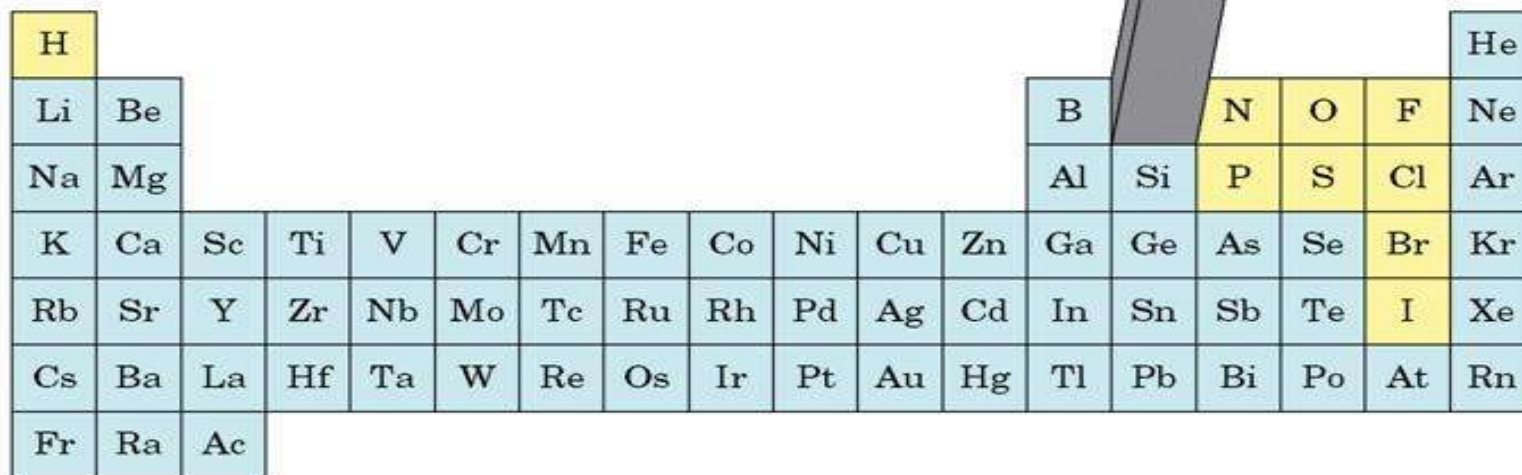
- Ενοποιημένη είναι πια η Χημεία. Όσες αρχές διέπουν τις ανόργανες ενώσεις, οι ίδιες ακριβώς διέπουν και τις πιο πολύπλοκες οργανικές ενώσεις.

Το μόνο ιδιαίτερο χαρακτηριστικό των οργανικών ενώσεων είναι πως όλες περιέχουν άτομο ή άτομα άνθρακα, C.

Οι περισσότερες βέβαια περιέχουν και H και αρκετές περιέχουν και N, O, P, S, Cl ή άλλα άτομα.

ΑΡΑ Η ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ ΕΧΕΙ ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ ΜΕΛΕΤΗΣ ΤΙΣ ΕΝΩΣΕΙΣ ΤΟΥ ΑΝΘΡΑΚΑ.

- C:** Στοιχείο με ατομικό αριθμό 6, της 2^{ης} περιόδου του Π.Π. και της 4^{ης} κύριας ομάδας.



H																		He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac																

Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



Το ιδιαίτερο χαρακτηριστικό των ενώσεων που σχηματίζει ο άνθρακας, είναι η πολύ μεγάλη ποικιλία τους.

Ατομική δομή - Τροχιακά

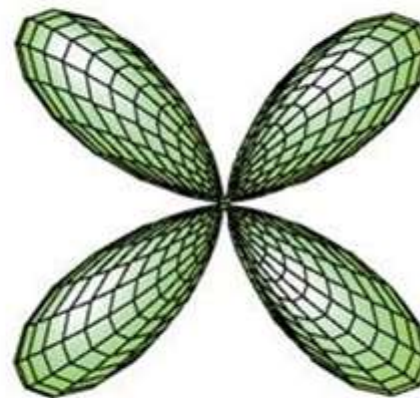
- Τα τροχιακά, ή κυματικές συναρτήσεις όπως αλλιώς λέγονται, είναι λύσεις κυματικής εξίσωσης (Schrodinger) και συμβολίζονται με ψ .
- Το ψ^2 έχει φυσική σημασία.



Τροχιακό s



Τροχιακό p

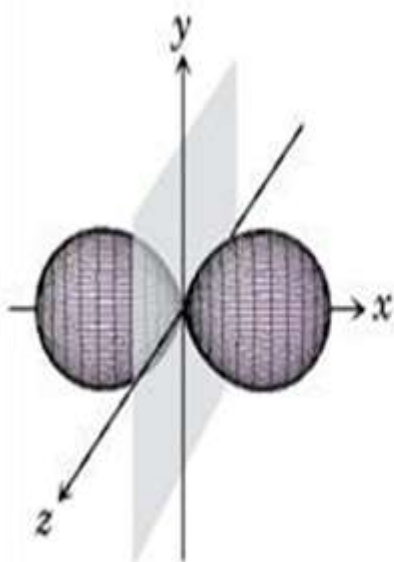


Τροχιακό d

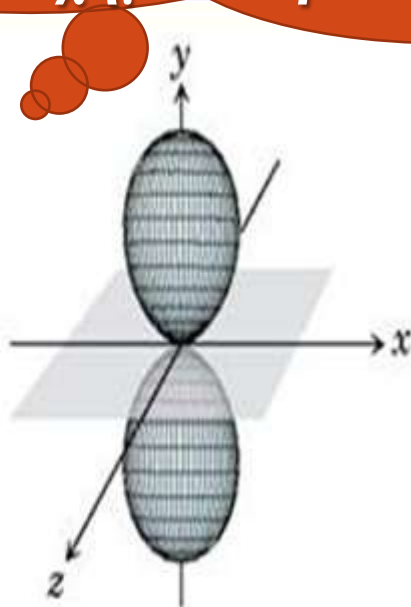
Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης

Τροχιακά p

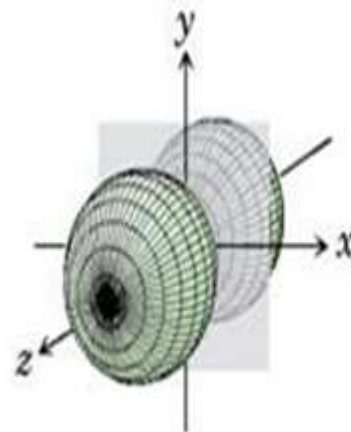
Κάθε ένα από αυτά έχει ένα κομβικό επίπεδο, που περνά μεταξύ των δυο λοβών. Αυτό έχει μηδενική ηλεκτρονιακή πυκνότητα και πολύ μεγάλες συνέπειες στη χημικά δραστηκότητα.



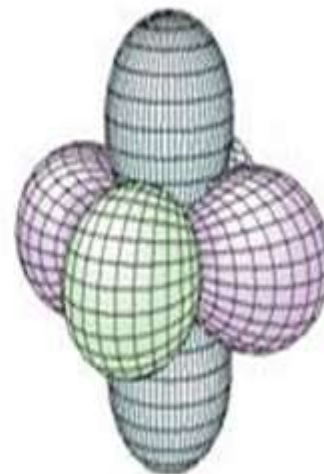
Τροχιακό $2p_x$



Τροχιακό $2p_y$



Τροχιακό $2p_z$



Τρία τροχιακά $2p$

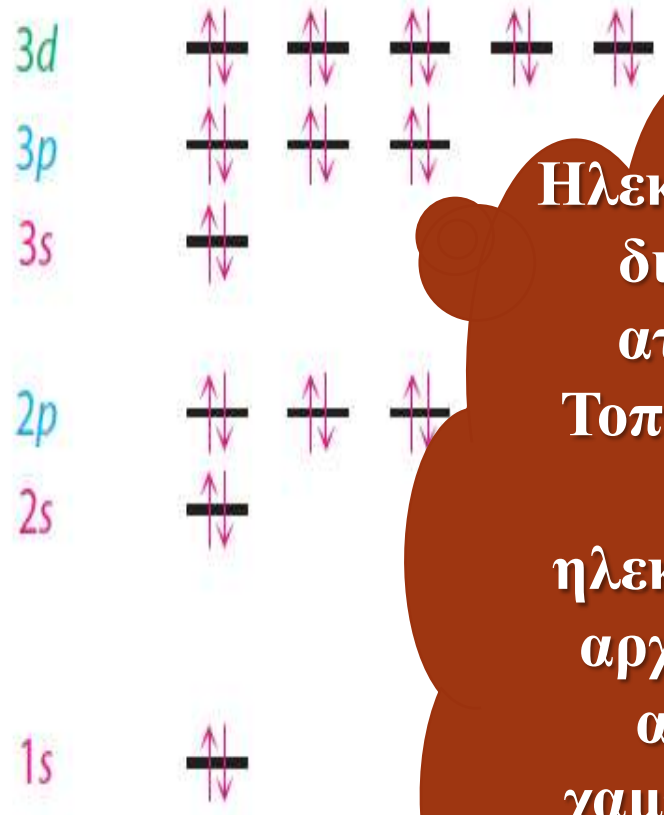
Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



3η στιβάδα
(χωρητικότητα - 18 ηλεκτρόνια)

2η στιβάδα
(χωρητικότητα - 8 ηλεκτρόνια)

1η στιβάδα
(χωρητικότητα - 2 ηλεκτρόνια)



**Ηλεκτρονιακή
διάταξη
ατόμου:
Τοποθέτηση
των
ηλεκτρονίων
αρχίζοντας
από τα
χαμηλότερα
ενεργειακά
τροχιακά.**

Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης

Ηλεκτρονιακές διατάξεις βασικής κατάστασης C, H και P

Στοιχείο	Ατομικός αριθμός	Ηλεκτρονιακή διάταξη	Στοιχείο	Ατομικός αριθμός	Ηλεκτρονιακή διάταξη
Υδρογόνο	1	1s \uparrow	Φωσφόρος	15	3p \uparrow \uparrow \uparrow
Άνθρακας	6	2p \uparrow \uparrow $-$			3s $\uparrow\downarrow$
		2s $\uparrow\downarrow$			2p $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$ $\uparrow\downarrow$
		1s $\uparrow\downarrow$			2s $\uparrow\downarrow$
					1s $\uparrow\downarrow$

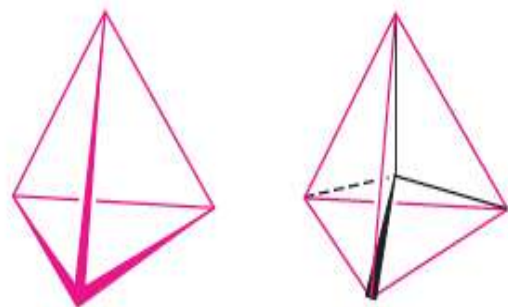
Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



**Ο C έχει τέσσερις μονάδες συγγένειας
(σύμφωνα με Kekule, Couper).
Σχηματίζει πάντα 4 δεσμούς όταν συνδέεται
με άλλα στοιχεία, ώστε να σχηματιστούν
σταθερές ενώσεις.**



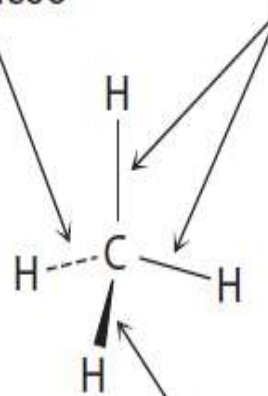
Van' t Hoff : Πρότεινε πως τα 4 άτομα με τα οποία είναι συνδεδεμένος ο C, τοποθετούνται στις γωνίες κανονικού τετραέδρου με τον άνθρακα στο κέντρο.



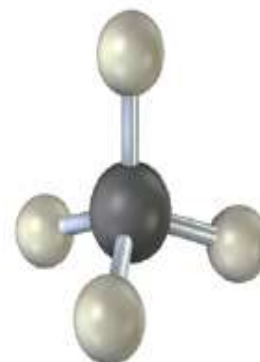
Κανονικό τετραέδρο

Δεσμός που κατευθύνεται πίσω από το επίπεδο της σελίδας

Δεσμοί στο επίπεδο της σελίδας



Δεσμός που εξέρχεται του επιπέδου της σελίδας

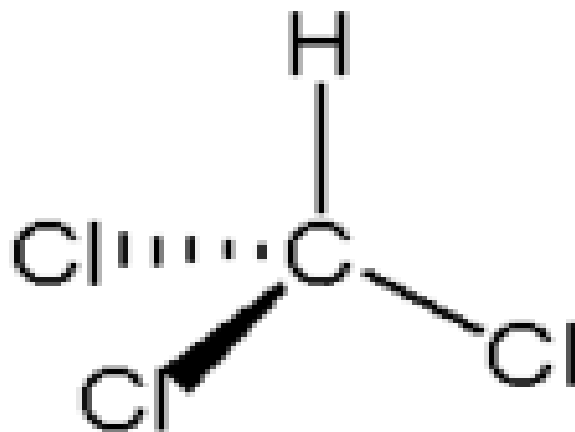


Ένα τετραεδρικό άτομο άνθρακα

Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



Παράδειγμα: Να σχεδιαστεί το μόριο του χλωροφορμίου με έντονες, κανονικές και διακεκομμένες γραμμές, για να φανεί η τετραεδρική του γεωμετρία.





Φύση του χημικού δεσμού

Η φύση του ετεροπολικού ή ιοντικού δεσμού εύκολα έγινε κατανοητή από τα πρώτα πειράματα της ηλεκτρόλυσης.

Δύο είδη δεσμών :

- Οι ιοντικοί
- Οι ομοιοπολικοί

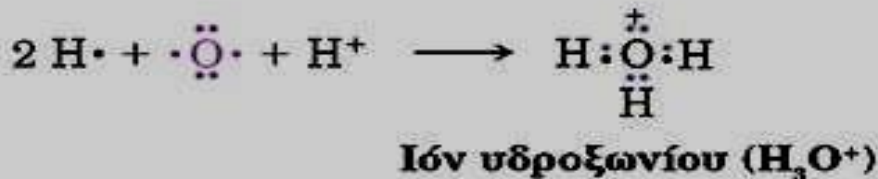
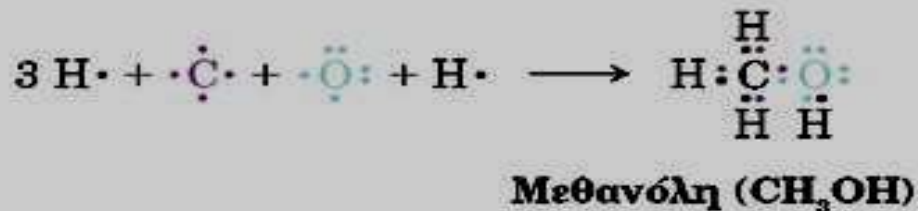
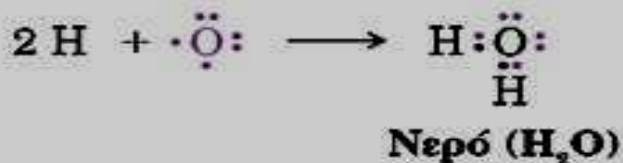
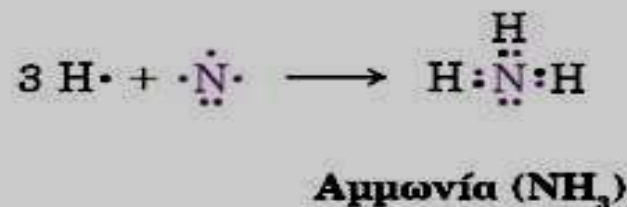
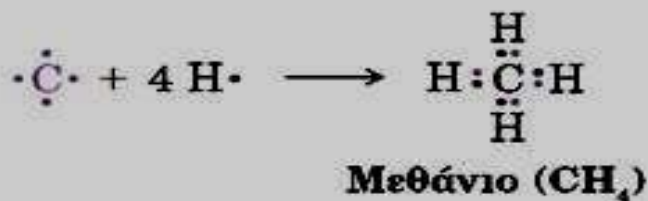
- Όταν ένας χημικός δεσμός σχηματίζεται απελευθερώνεται ενέργεια. Η δημιουργία χημικού δεσμού οδηγεί το σύστημα σε χαμηλότερη ενέργεια και το κάνει πιο σταθερό.
- Όταν ένας χημικός δεσμός διασπάται, απορροφάται ενέργεια και προστίθεται στο σύστημα.



**Όταν ένα ζεύγος ηλεκτρονίων
ανήκει ταυτόχρονα σε δύο άτομα
σηματίζονται οι ομοιοπολικοί
δεσμοί.**

Ομοιοπολικοί δεσμοί

Ο εύκολος τρόπος να παρασταθούν οι ομοιοπολικοί δεσμοί είναι οι δομές Lewis, στις οποίες τα ηλεκτρόνια σθένους παριστάνονται με τελείες.



Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



Όνομασία	Δομή Lewis	Δομή Kekulé	Όνομασία	Δομή Lewis	Δομή Kekulé
Νερό (H ₂ O)	$\text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$	$\text{H}-\text{O}-\text{H}$	Μεθάνιο (CH ₄)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \text{H}:\ddot{\text{C}}:\text{H} \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$
Αμμωνία (NH ₃)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \text{H}:\ddot{\text{N}}:\text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \end{array}$	Μεθανόλη (CH ₃ OH)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \text{H}:\ddot{\text{C}}:\ddot{\text{O}}:\text{H} \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$

Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



Δύο θεωρίες υπάρχουν για την εξήγηση του ομοιοπολικού δεσμού:

- **Η θεωρία δεσμού σθένους:**

Σύμφωνα με αυτή, ομοιοπολικός δεσμός δημιουργείται με την αλληλοεπικάλυψη δύο ατομικών τροχιακών.

Με αυτή εξηγούνται πολύ καλά οι απλοί δεσμοί.

- **Η θεωρία μοριακών τροχιακών:**

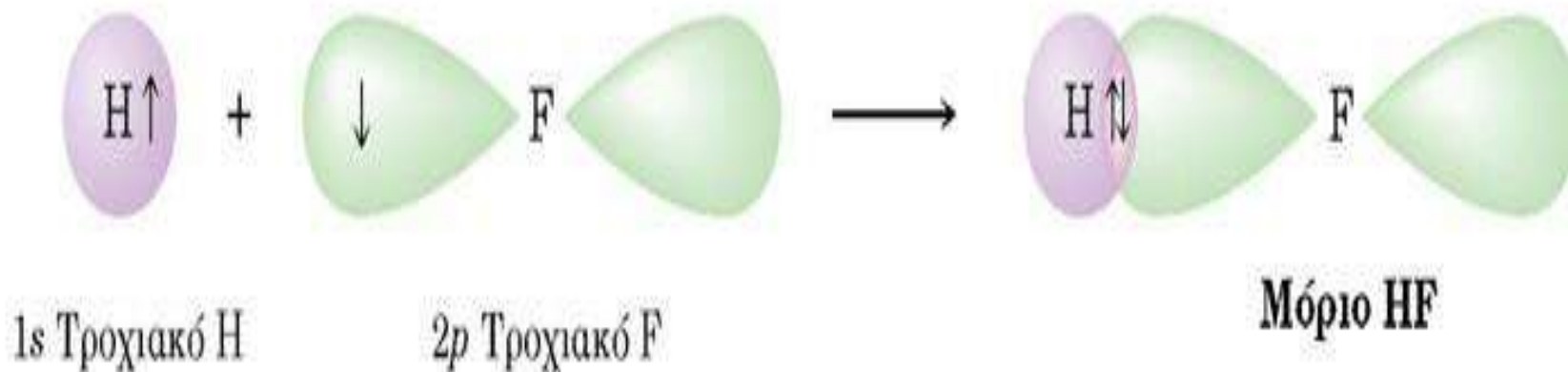
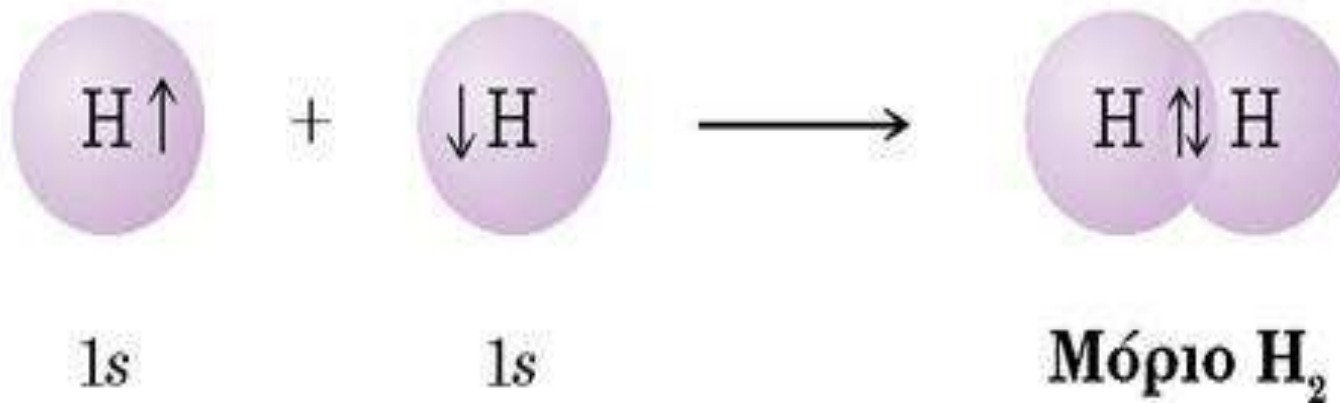
Σύμφωνα με αυτή, με το συνδυασμό ατομικών τροχιακών σε μοριακά τροχιακά που ανήκουν σε όλο το μόριο, σχηματίζονται ομοιοπολικοί δεσμοί.

Με αυτή εξηγούνται πολύ καλά οι πολλαπλοί δεσμοί.



Θεωρία δεσμού σθένους

- Με αλληλοεπικάλυψη ατομικών τροχιακών που το κάθε ένα περιέχει ένα ηλεκτρόνιο αντίθετου σπιν, σχηματίζονται οι ομοιοπολικοί δεσμοί.
- Τα άτομα που συνδέονται, διατηρούν τα ατομικά τους τροχιακά, όμως το ζευγάρι ηλεκτρονίων στα τροχιακά που αλληλοεπικαλύπτονται, ανήκει και στα δύο αυτά άτομα.
- Ο ομοιοπολικός δεσμός που προκύπτει, είναι τόσο ισχυρότερος, όσο μεγαλύτερη είναι η αλληλοεπικάλυψη των τροχιακών.

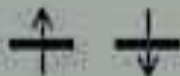


Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης

Το μόριο του H_2 έχει χαμηλότερη ενέργεια από τα δύο άτομα του υδρογόνου και έτσι απελευθερώνεται ενέργεια όταν σχηματίζεται ο δεσμός.



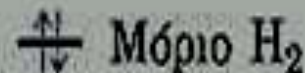
Δύο άτομα υδρογόνου



$$2 \times 218 = 436 \text{ kJ/mol}$$

Απελευθερώνεται όταν σχηματίζεται ο δεσμός

Απορροφάται όταν διασπάται ο δεσμός



Ενέργεια

Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης




Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση
Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης
Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης,
Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης

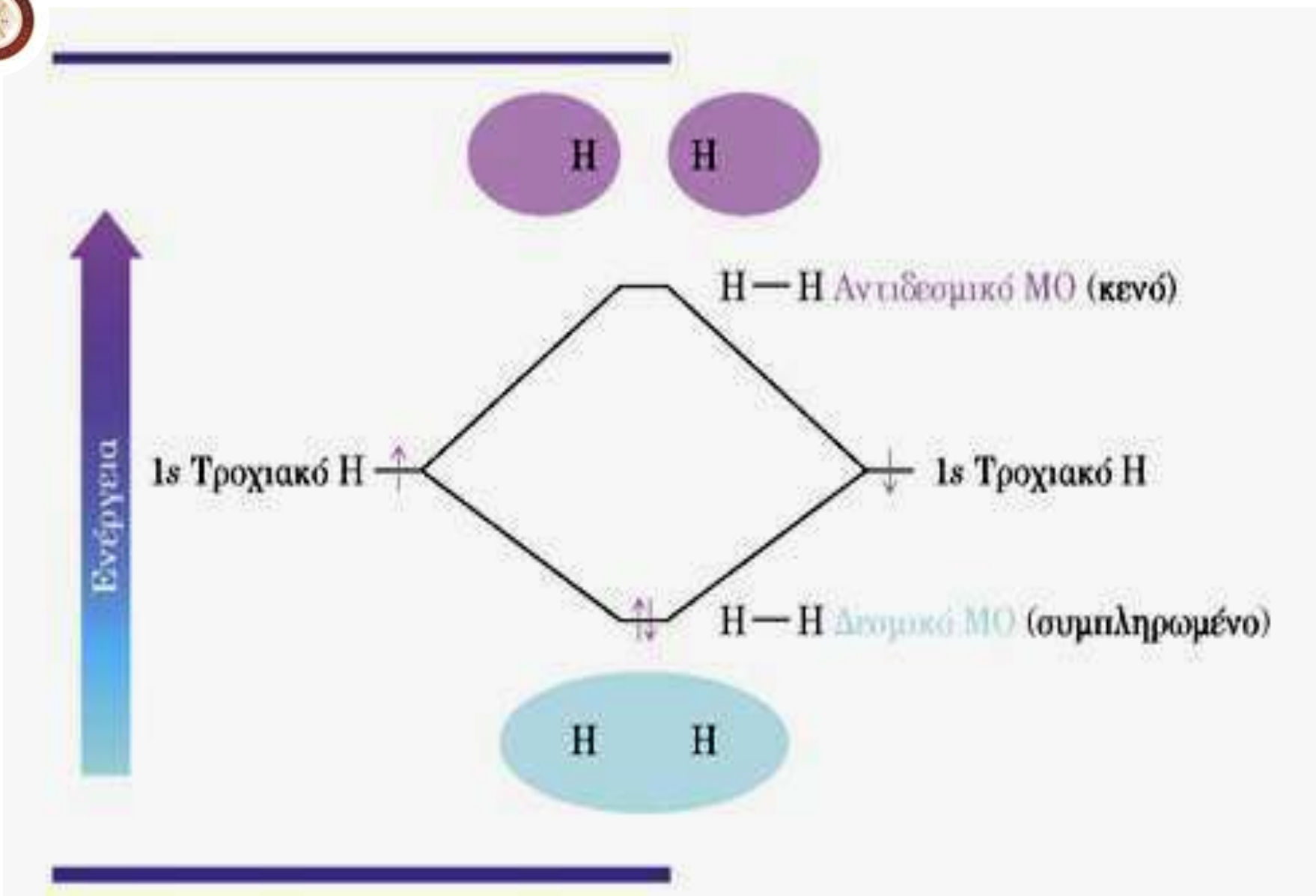
Μήκος δεσμού, καλείται η απόσταση στο χαμηλότερο ενεργειακό σημείο.



Θεωρία μοριακών τροχιακών

- Ότι είναι για τα άτομα τα ατομικά τροχιακά, είναι για τα μόρια τα μοριακά τροχιακά. Δηλαδή περιγράφουν τις περιοχές του χώρου που προτιμούν να βρίσκονται τα ηλεκτρόνια σε ένα μόριο. Έχουν ειδικό μέγεθος, ειδικό σχήμα, καθώς και ενεργειακό επίπεδο.
- Ο αριθμός των μοριακών τροχιακών που σχηματίζονται όταν συνδυάζονται ατομικά τροχιακά, είναι ίδιος με τον αριθμό των ατομικών τροχιακών.
- Τα χαμηλότερης ενέργειας από τα αρχικά ατομικά τροχιακά, λέγονται δεσμικά τροχιακά, ενώ αντιδεσμικά μοριακά τροχιακά, λέγονται τα υψηλότερης ενέργειας από τα αρχικά ατομικά τροχιακά.

- 
- Τα δεσμικά τροχιακά, έχουν μέγιστη ηλεκτρονική πυκνότητα μεταξύ των δυο πυρήνων.
 - Τα αντιδεσμικά έχουν ελάχιστη ηλεκτρονική πυκνότητα ανάμεσα στους δυο πυρήνες.



Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



Δεσμοί σίγμα (σ)

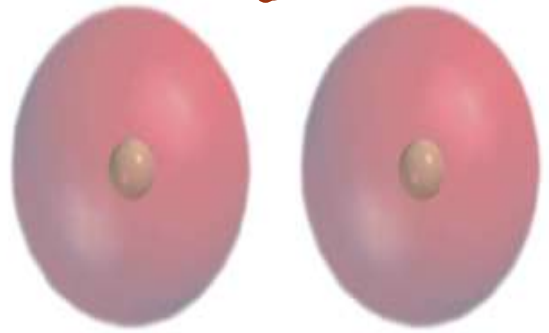
- Εμφανίζουν κυκλική διατομή και σχηματίζονται όταν τα τροχιακά αλληλεπικαλύπτονται μετωπικά.

Δεσμοί πι (π)

- Εδώ τα τροχιακά αλληλεπικαλύπτονται πλευρικά.

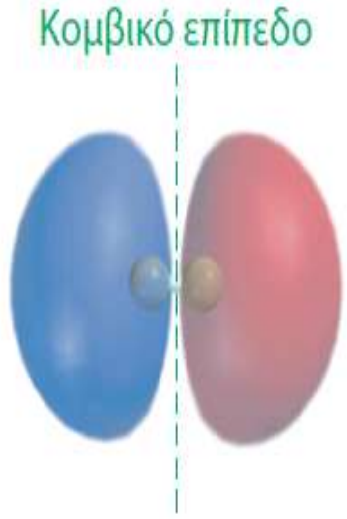


**Δεσμός σ στο
μόριο του
υδρογόνου**



Δύο τροχιακά 1s

Συνδυασμός \rightarrow



σ^* Αντιδεσμικό MO
(μη συμπληρωμένο)

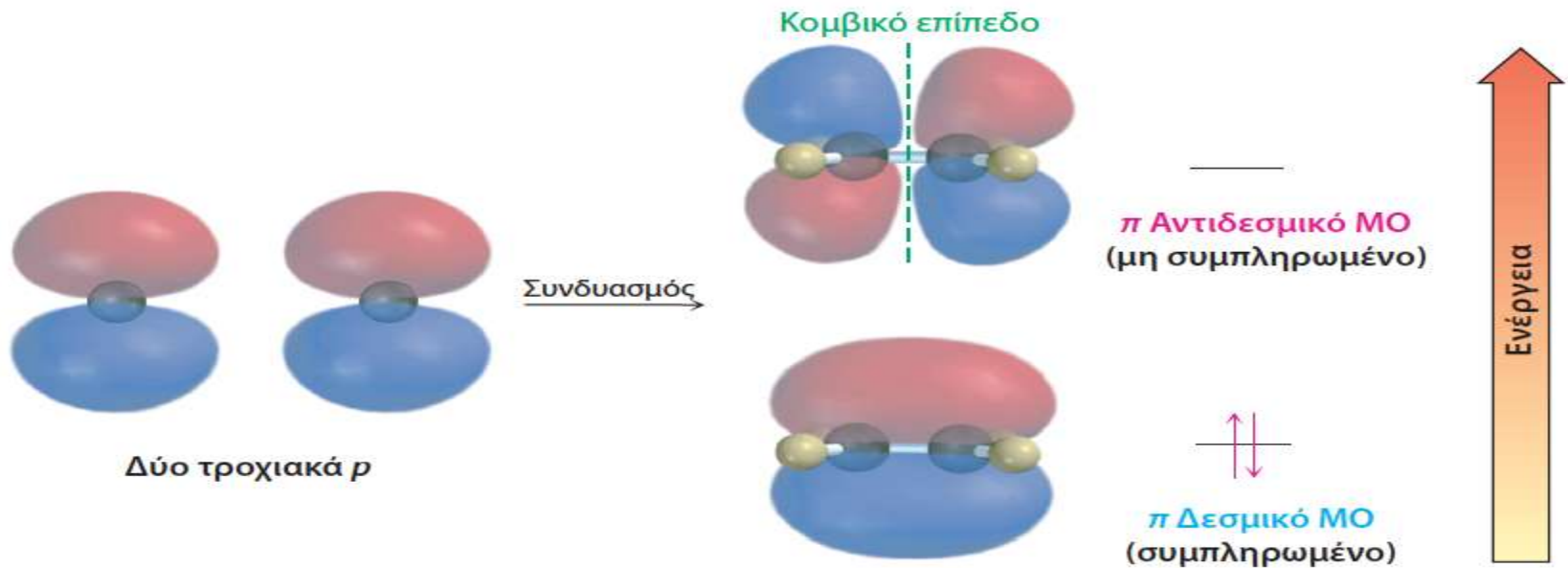


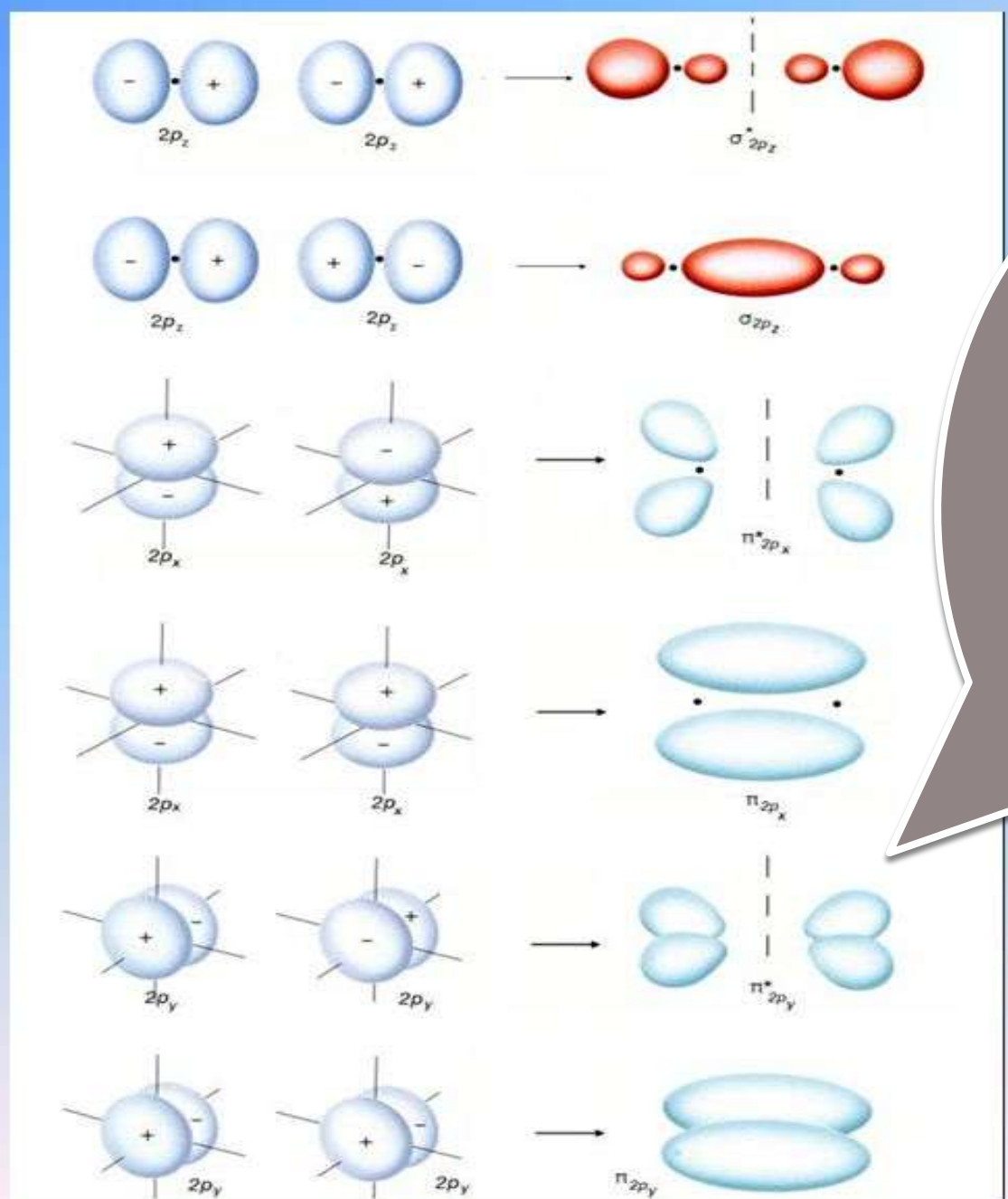
σ Δεσμικό MO
(συμπληρωμένο)





Ο π δεσμός στο αιθυλένιο. Το π δεσμικό μοριακό τροχιακό χαμηλότερης ενέργειας προκύπτει από προσθετικό συνδυασμό p τροχιακών ίδιου πρόσημου. Το π αντιδεσμικό, (υψηλότερης ενέργειας), από αφαιρετικό συνδυασμό μοριακών τροχιακών p αντίθετου προσήμου, (είναι κενό).





Μοριακά τροχιακά από συνδυασμό των 2p ατομικών τροχιακών για ομοπυρηνικά διατομικά μόρια.



**Ο άνθρακας για να σχηματίσει
δεσμούς στα οργανικά μόρια
χρησιμοποιεί υβριδικά
τροχιακά.**



Υβριδισμός

- Σύμφωνα με τη θεωρία του υβριδισμού, για τη δημιουργία μοριακών τροχιακών δεν χρησιμοποιούνται αμιγή ατομικά τροχιακά, μα συμμιγή ατομικά τροχιακά. Τα τελευταία είναι τροχιακά που προκύπτουν από ανάμιξη απλών ατομικών τροχιακών.
- Μαθηματικά δεν χρησιμοποιούνται οι κυματοσυναρτήσεις που χρησιμοποιούνται στα ατομικά τροχιακά, αλλά γραμμικοί συνδυασμοί τους.



Υβριδισμός

- Ο υβριδισμός δεν είναι η αιτία που τα μόρια εμφανίζουν συγκεκριμένη γεωμετρία, αλλά χρησιμοποιείται για να εξηγήσει τη γεωμετρία η οποία πειραματικά προσδιορίζεται.

Όταν μιλάμε για σχηματισμό υβριδικών τροχιακών, μιλάμε για ανάμιξη ατομικών τροχιακών του ίδιου ατόμου και τα ατομικά τροχιακά που προκύπτουν δεν είναι μοριακά τροχιακά.



Υβριδισμός

- Τροχιακό sp προκύπτει από την ανάμιξη ενός s και ενός p τροχιακού.
- Τροχιακό sp^2 προκύπτει από ανάμιξη ενός s και δύο p τροχιακών.
- Τροχιακό sp^3 προκύπτει από την ανάμιξη ενός s και τριών p τροχιακών.

Τετραεδρική
γεωμετρία $109,5^\circ$

Όταν ο C σχηματίζει μόνο απλούς δεσμούς έχει sp^3 υβριδισμό και 4 ισοδύναμα sp^3 υβριδισμένα τροχιακά.

Γραμμική
γεωμετρία 180°

Όταν ο C σχηματίζει ένα τριπλό δεσμό είναι sp υβριδισμένος και διαθέτει δυο ισοδύναμα υβριδισμένα sp τροχιακά και δύο p μη υβριδισμένα τροχιακά.

Ο τριπλός δεσμός άνθρακα – άνθρακα σχηματίζεται όταν δυο sp υβριδισμένα άτομα άνθρακα συνδέονται μεταξύ τους.

Επίπεδη (τριγωνική)
γεωμετρία 120°

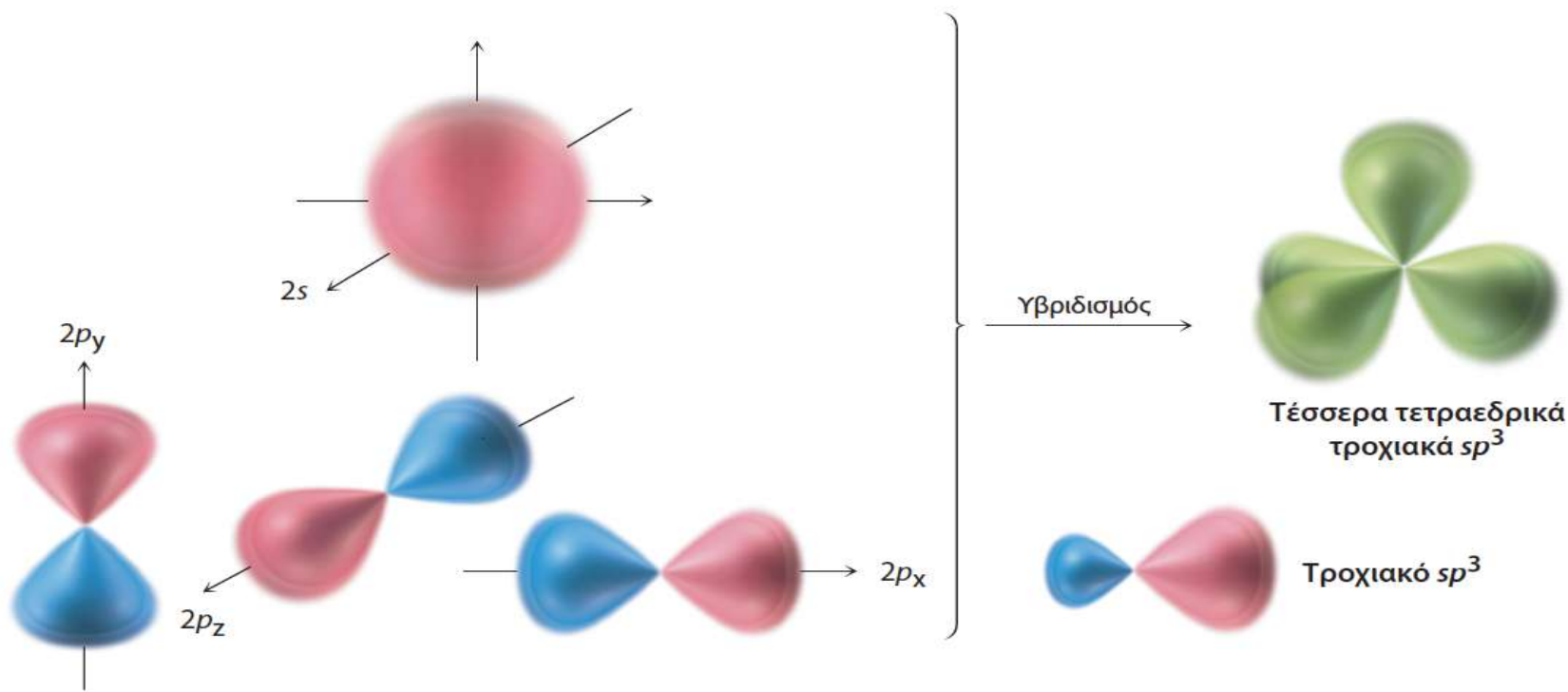
Όταν ο C σχηματίζει ένα διπλό δεσμό έχει sp^2 υβριδισμό και 3 ισοδύναμα sp^2 υβριδισμένα τροχιακά καθώς και ένα μη υβριδισμένο τροχιακό p .
Ο διπλός δεσμός άνθρακα – άνθρακα σχηματίζεται όταν συνδέονται μεταξύ τους 2 άτομα C sp^2 .



Υβριδισμός Τροχιακό sp^3

Δομή Μεθανίου CH_4

Σχηματίζονται 4 sp^3 υβριδικά τροχιακά που κατευθύνονται προς τις γωνίες κανονικού τετραέδρου

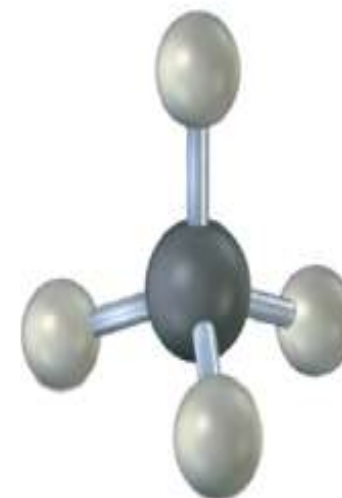
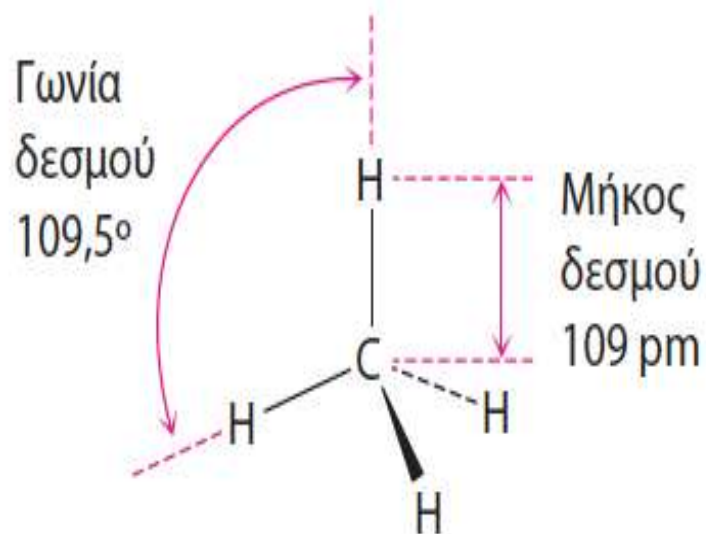


Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης


Αγγελική Απ. Γαλάνη



Η δομή του μεθανίου



Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



Θα περίμενε κανείς να έχει το μεθάνιο δύο είδη δεσμών C-H αφού ο C έχει δύο είδη τροχιακών $2s$ και $2p$.

- Ο υβριδισμός ερμηνεύει το γιατί ο άνθρακας στο μεθάνιο, σχηματίζει τέσσερις δεσμούς που είναι ισοδύναμοι, όμως δεν είναι δυνατόν να εξηγήσει γιατί το κάνει.

Η απάντηση δίνεται παρατηρώντας πλευρικά ένα υβριδικό sp^3 τροχιακό.

- Τα υβριδικά τροχιακά που σχηματίζονται όταν ένα τροχιακό s υβριδίζεται με τρία τροχιακά p είναι ασύμμετρα διατεταγμένα γύρω από τον πυρήνα και ο ένας από τους δύο λοβούς του sp^3 είναι μεγαλύτερος από τον άλλο. Έτσι αλληλεπικαλύπτεται καλύτερα με τροχιακό άλλου ατόμου όταν σχηματίζει μαζί του δεσμό και ο δεσμός αυτός είναι και ισχυρότερος από τα μη υβριδοποιημένα s ή p τροχιακά.



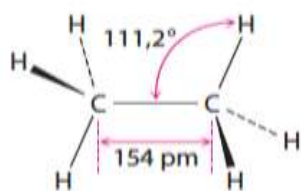
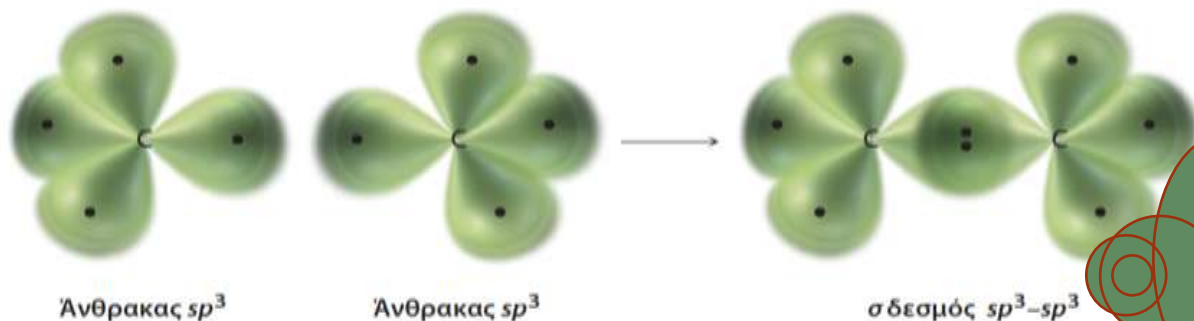
Δομή αιθανίου

- Ο υβριδισμός που χρησιμοποιείται για να εξηγηθεί η δομή του CH_4 , μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για την ερμηνεία των δεσμών που τα άτομα C σχηματίζουν μεταξύ τους και έτσι προκύπτουν πολυάριθμες οργανικές ενώσεις.

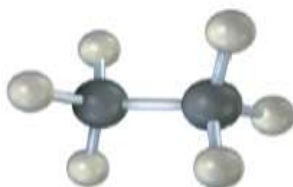
Το απλούστερο άτομο με δεσμό άνθρακα – άνθρακα είναι το αιθάνιο.



Δομή αιθανίου



Αιθάνιο



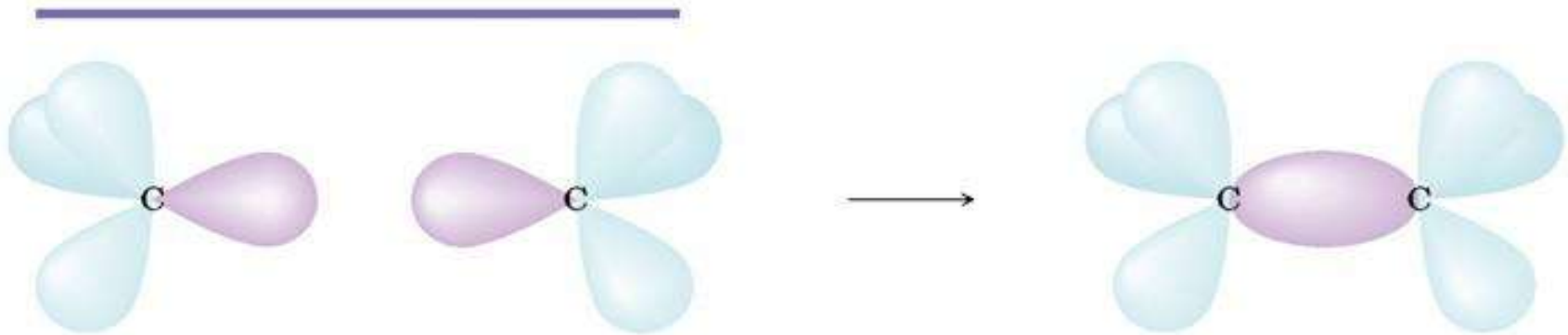
Τα δύο άτομα C, συνδέονται μεταξύ τους με αλληλοεπικάλυψη σ , sp^3 υβριδικού τροχιακού από το κάθε ένα.

Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακή ομάδα Χημείας Κρήτης

Τα τροχιακά $1s$ του υδρογόνου, αλληλεπικαλύπτονται με τα υπόλοιπα τρία sp^3 υβριδικά τροχιακά του κάθε άνθρακα κι έτσι έχουμε 6 δεσμούς C-H. Οι γωνίες δεσμών του αιθανίου, τείνουν στην τετραεδρική τιμή των $109,5^\circ$.



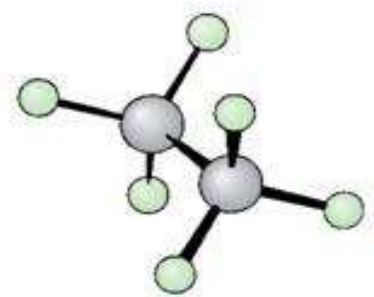
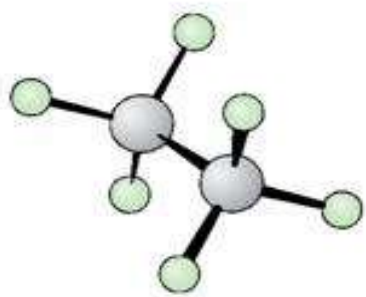
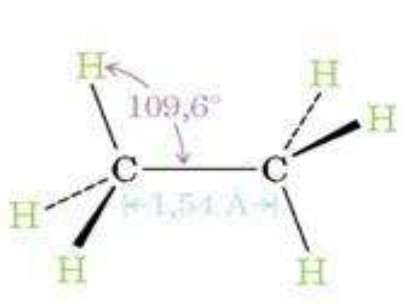
Δομή αιθανίου



Άνθρακας sp^3

Άνθρακας sp^3

sp^3-sp^3 Δεσμός σίγμα



Στερεοσκοπική άποψη

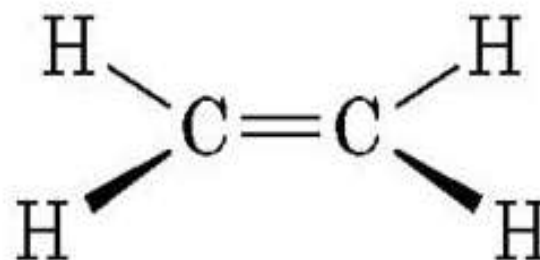
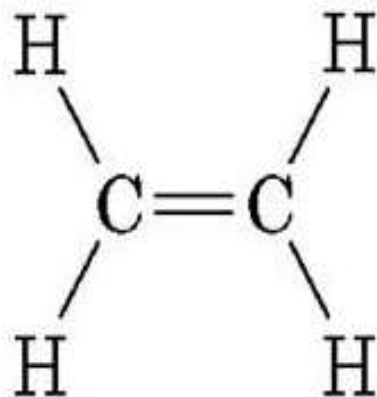
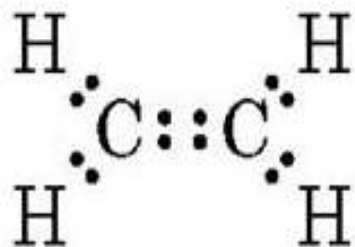
Εικόνα από: Οργανική Χημεία John Mcurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης

Αγγελική Απ. Γαλάνη



Υβριδισμός sp^2

Δομή αιθυλενίου



Κάτοψη

Πλάγια όψη

Αιθυλένιο

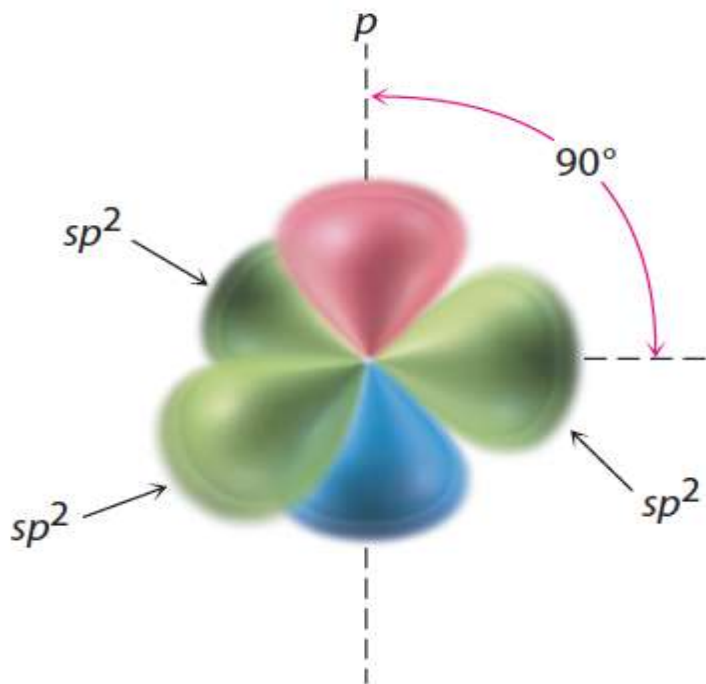
Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



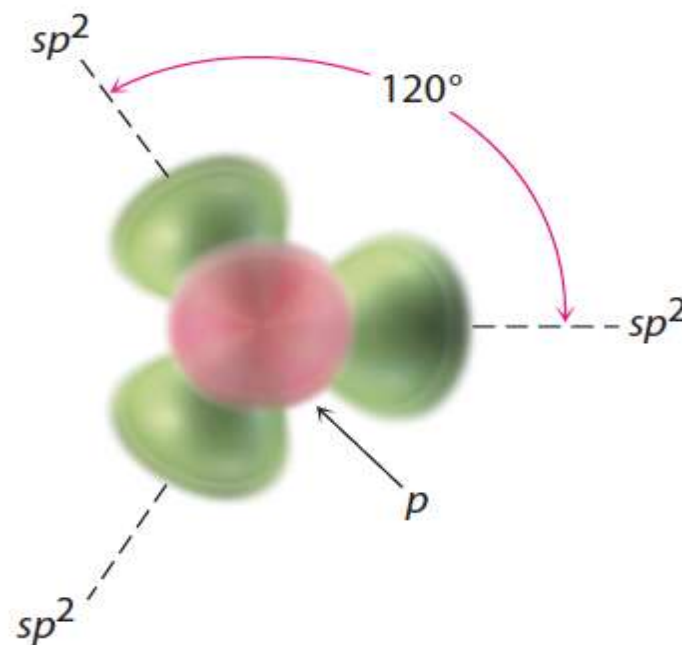
Υβριδισμός Τροχιακό sp^2

Τα 3 sp^2 , είναι σε ένα επίπεδο και σχηματίζουν γωνίες 120° μεταξύ τους και τα p τροχιακά που απομένουν είναι κάθετα στο επίπεδο των sp^2 .

Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση
Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης
Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης,
Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



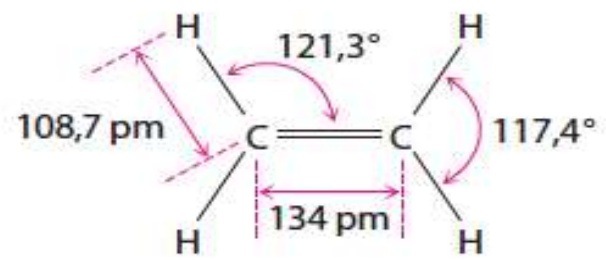
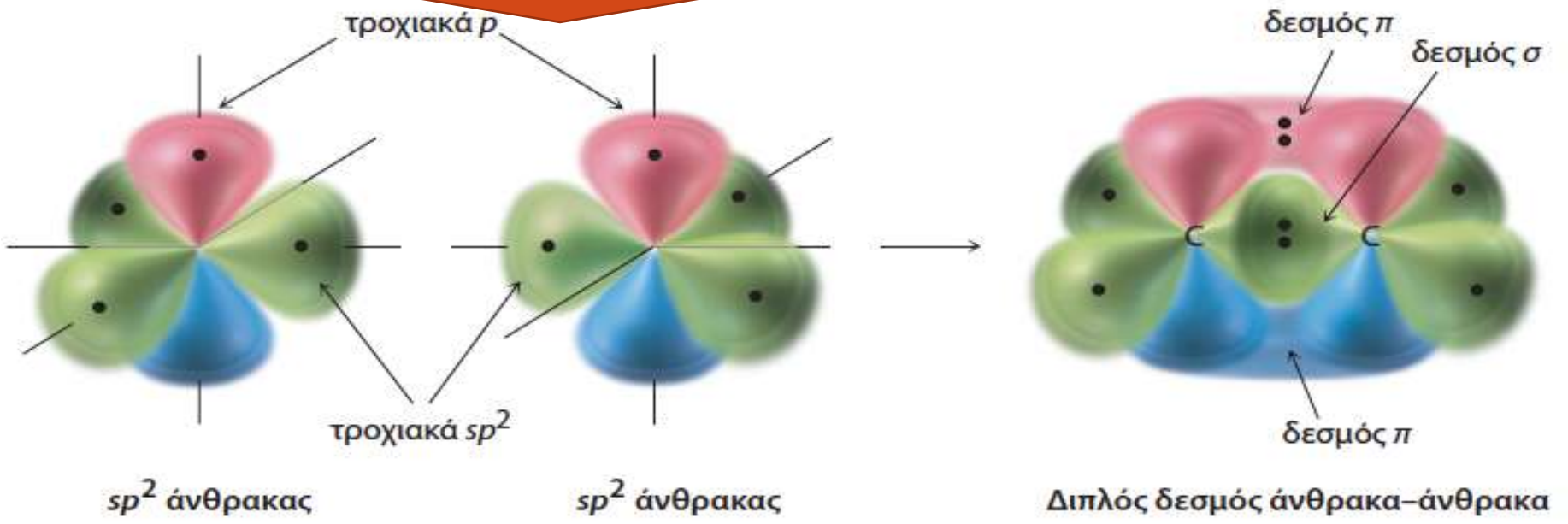
Πλευρική όψη



Κάτοψη



2 sp^2 υβριδοποιημένοι C πλησιάζουν και σχηματίζουν σ δεσμό από επικάλυψη sp^2-sp^2 . Τα μη υβριδοποιημένα τροχιακά p του κάθε C σχηματίζουν με πλευρική επικάλυψη π δεσμό.

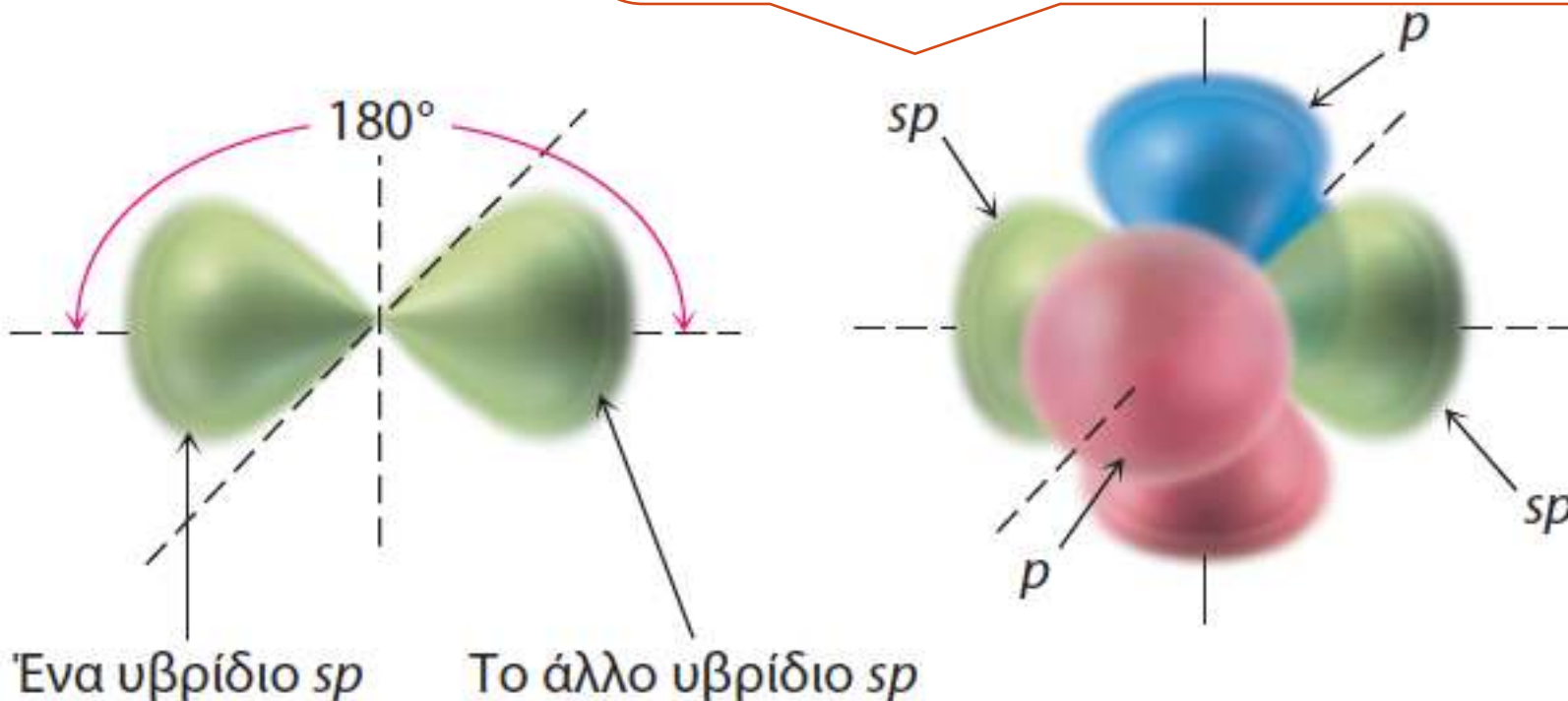


Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



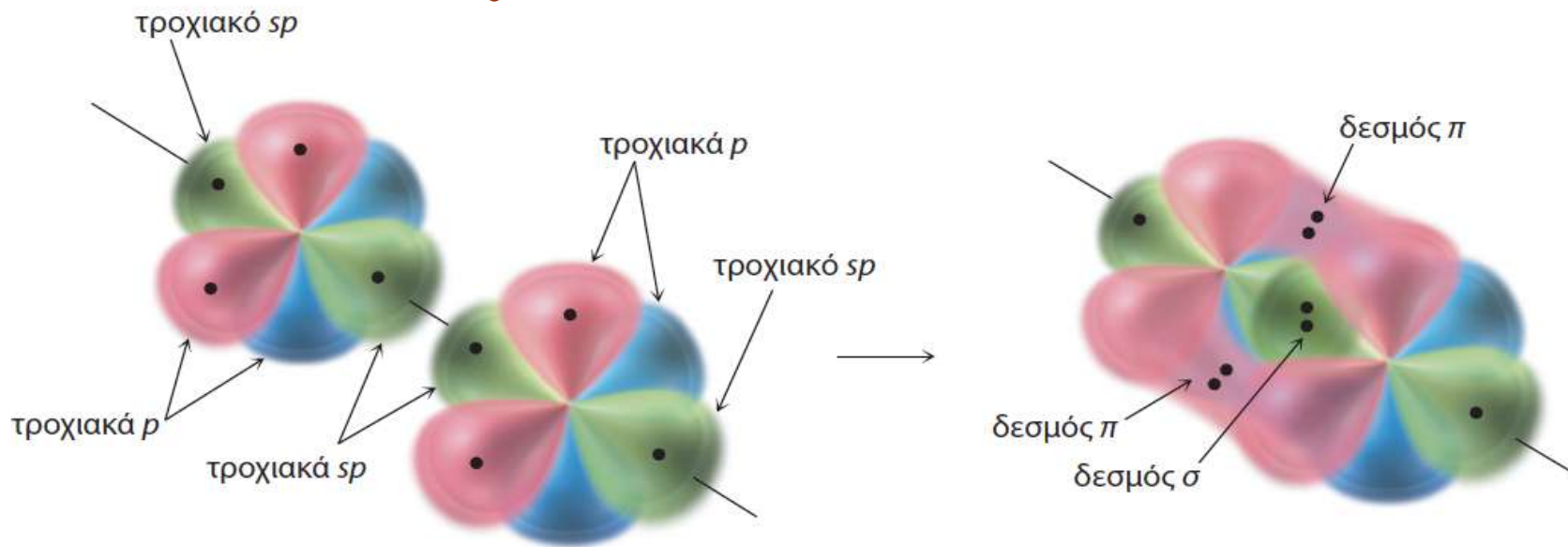
Υβριδισμός sp Δομή ακετυλενίου

Τα 2 υβριδικά τροχιακά sp σχηματίζουν γωνία 180° μεταξύ τους και με τα 2 μη υβριδισμένα p τροχιακά σχηματίζουν ορθή γωνία.

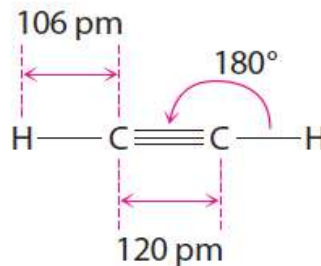


Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης

Τα 2 άτομα C ενώνονται με ένα σ δεσμό από αλληλεπικάλυψη $sp-sp$ και 2 π δεσμούς από αλληλεπικάλυψη $p-p$



Τριπλός δεσμός άνθρακα-άνθρακα



Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης
Αγγελική Απ. Γαλάνη



Μόριο	Δεσμός	Ισχύς δεσμού		Μήκος δεσμού (pm)
		(kJ/mol)	(kcal/mol)	
Μεθάνιο, CH ₄	(<i>sp</i> ³) C–H	439	105	109
Αιθάνιο, CH ₃ CH ₃	(<i>sp</i> ³) C–C (<i>sp</i> ³)	377	90	154
	(<i>sp</i> ³) C–H	421	101	109
Αιθυλένιο, H ₂ C=CH ₂	(<i>sp</i> ²) C=C (<i>sp</i> ²)	728	174	134
	(<i>sp</i> ²) C–H	464	111	109
Ακετυλένιο, HC≡CH	(<i>sp</i>) C≡C (<i>sp</i>)	965	231	120
	(<i>sp</i>) C–H	558	133	106

Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης



Χημική τοξικότητα

- Η αξιολόγηση της άμεσης, (όχι της μακροπρόθεσμης), χημικής τοξικότητας είναι η τιμή LD_{50} .

**Αντιστοιχεί στην ποσότητα
μιας ένωσης ανά Kg
σωματικού βάρους που
είναι θανατηφόρα για το
50% των πειραματόζωων.**



Χημική τοξικότητα

Ουσία	LD ₅₀ (g/kg)	Ουσία	LD ₅₀ (g/kg)
Στρυγγίνη	0,005	Χλωροφόρμιο	1,2
Τριοξειδίο του αρσενικού	0,015	Θεικός σίδηρος(II)	1,5
DDT	0,115	Αιθανόλη	10,6
Ασπιρίνη	1,1	Κυκλαμικό νάτριο	17

Εικόνα από: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης

Ερωτήσεις-Ασκήσεις

Πηγή: Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης.

1. Ποιοι είναι οι πιθανότεροι χημικοί τύποι των παρακάτω ουσιών: (α) CCl_x (β) CH_xCl_2
2. Σχεδιάστε τις δομές Kekulé για τις ουσίες που ακολουθούν, υποδεικνύοντας όλα τα αδεσμικά ηλεκτρόνια, (με τη βοήθεια των δομών Lewis): (α) CHCl_3 χλωροφόρμιο (b) CH_3NH_2 μεθυλαμίνη
3. Για ποιο λόγο δεν μπορεί να υπάρξει οργανικό μόριο με μοριακό τύπο C_2H_7 ;
4. Σχεδιάστε μια δομή Kekulé για το προπάνιο, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$. Προσδιορίστε την κατά προσέγγιση τιμή για κάθε γωνία δεσμού και υποδείξτε το συνολικό σχήμα του μορίου.
5. Σχεδιάστε τη δομή Kekulé για το προπένιο, $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}_2$. Υποδείξτε τον υβριδισμό των τροχιακών για κάθε άνθρακα και προσδιορίστε την τιμή κάθε γωνίας δεσμού.
6. Σχεδιάστε τη δομή Kekulé για το προπίνιο, $\text{CH}_3\text{C}\equiv\text{CH}$. Υποδείξτε τον υβριδισμό των τροχιακών κάθε άνθρακα και προβλέψτε την τιμή για κάθε γωνία δεσμού.



Βιβλιογραφία

- **Οργανική Χημεία John McMurry, Μετάφραση Επιστημονική επιμέλεια Αναστάσιος Βάρβογλης, Μιχάλης Ορφανόπουλος, Ιουλία Σμόνου, Μανώλης Στρατάκης, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης.**
- **<https://www.nature.com/subjects/asymmetric-catalysis>**
- **<http://www.pnas.org/content/101/15/5347>**
- **<http://www.msc.chembiol.chem.upatras.gr/el/>**
- **<https://brilliant.org/wiki/molecular-orbital-theory/#molecular-orbitals>**
- **<http://www.chemistryexplained.com/Ma-Na/Molecular-Orbital-Theory.html>**
- **<http://ecourses.dbnet.ntua.gr/fsr/9585/ANKEF9.ppt>**
- **[http://www.klouras.chem.upatras.gr/attachments/article/16/05_Chemical-Bond\(II\)_Quantum_Mechanics.pdf](http://www.klouras.chem.upatras.gr/attachments/article/16/05_Chemical-Bond(II)_Quantum_Mechanics.pdf)**