

Δεσμικότητα των οργανικών ενώσεων: Σχηματισμός δεσμών για τη δημιουργία ενώσεων πιο σταθερών από τα επιμέρους άτομα

Ιοντικός χαρακτήρας δεσμών

Ionic character



Symmetrical covalent bond

© Thomson - Brooks Cole

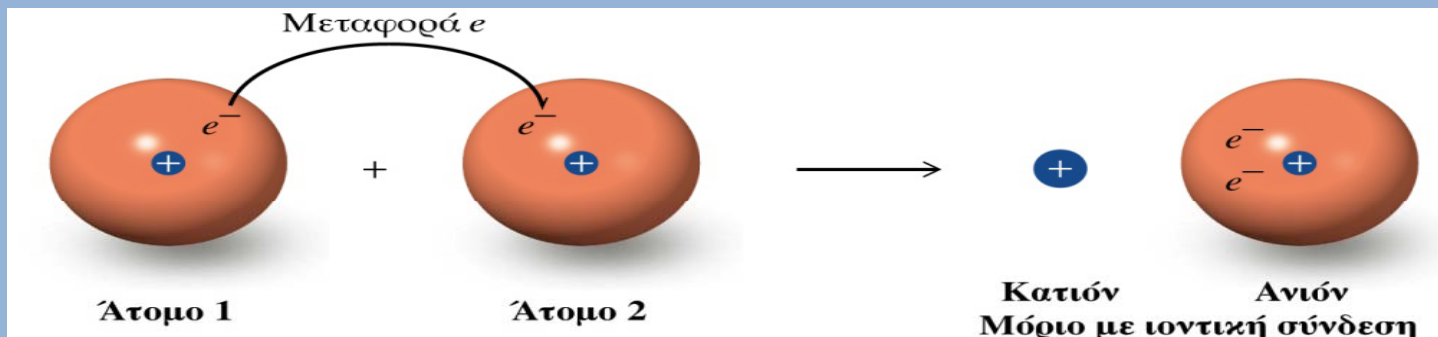


Polar covalent bonds



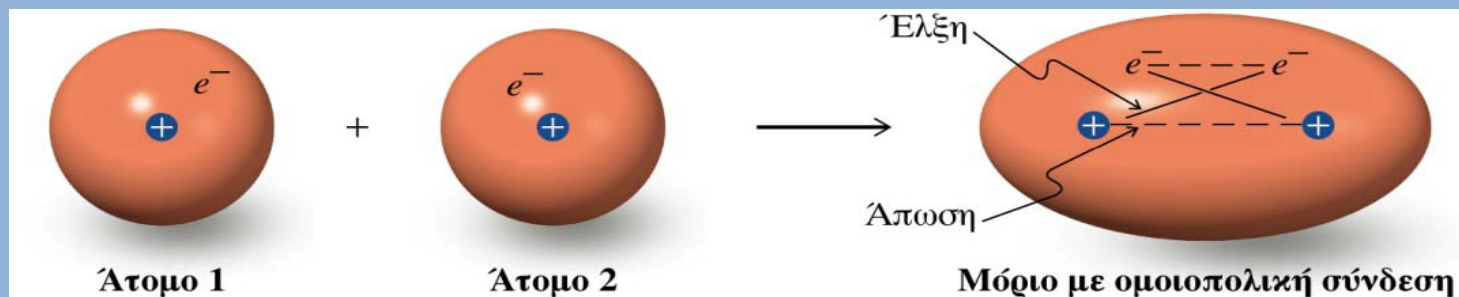
Ionic bond

❖ Οι ιοντικοί δεσμοί στα άλατα είναι αποτέλεσμα μεταφοράς e^-



Προκύπτει από την πλήρη μεταφορά ενός ηλεκτρονίου από το άτομο 1 στο άτομο 2, δημιουργώντας έτσι δύο ιόντα. Τα αντίθετα φορτία τους συντελούν ώστε τα ιόντα να έλκονται μεταξύ τους.

Οι ομοιοπολικοί δεσμοί στα οργανικά μόρια είναι αποτέλεσμα συνεισφοράς e^-



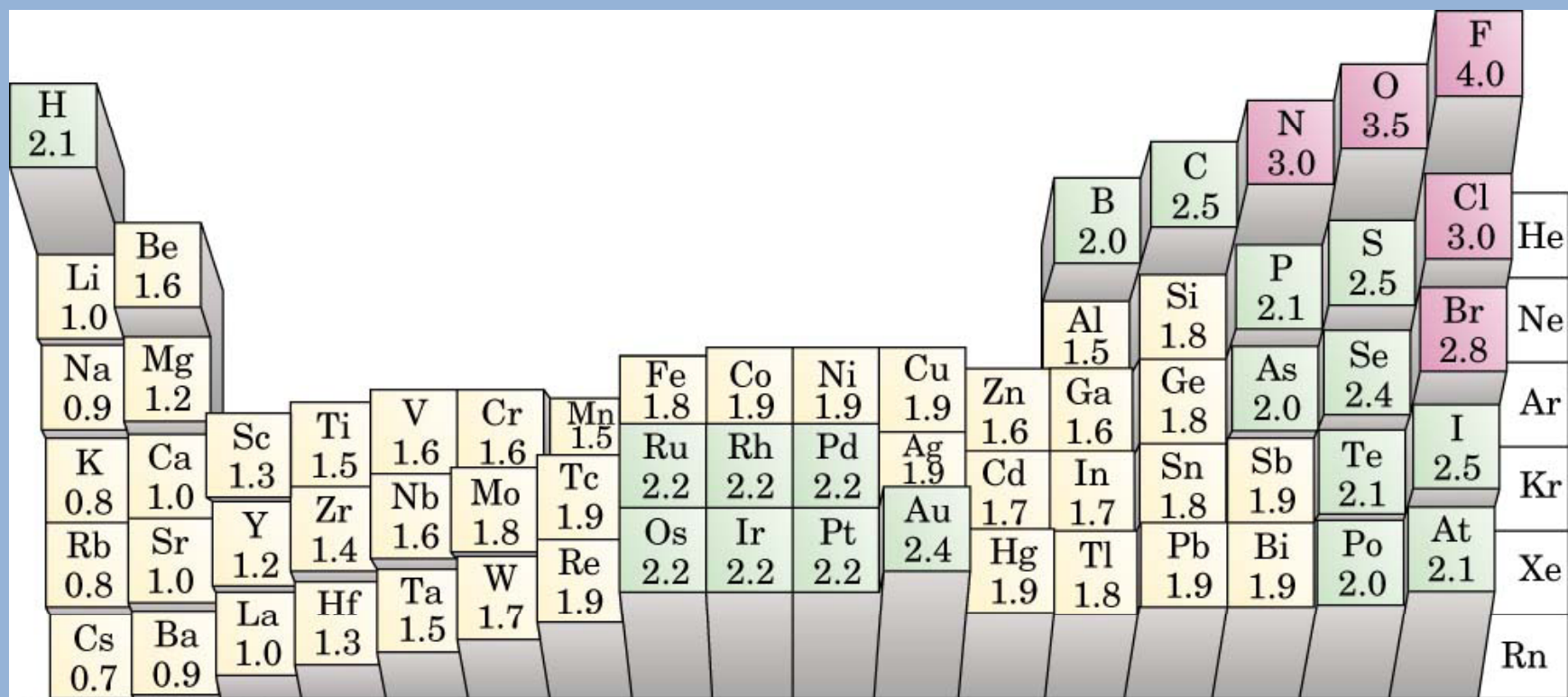
Ομοιοπολική σύνδεση. Ελκτικές (συνεχής γραμμή) και απωθητικές (διακεκομμένη γραμμή) δυνάμεις κατά τη σύνδεση μεταξύ δύο ατόμων.

- Οι Ομοιοπολικοί δεσμοί μπορεί να έχουν ιοντικό χαρακτήρα
- Υπάρχουν πολικοί ομοιοπολικοί δεσμοί – Ηλεκτρόνια σε ένα δεσμό (δεσμικά) έλκονται περισσότερο από το ένα άτομο
- Κατανομή ηλεκτρονίων μεταξύ ατόμων είναι ασύμμετρη

Πολικότητα δεσμών και ηλεκτραρνητικότητα

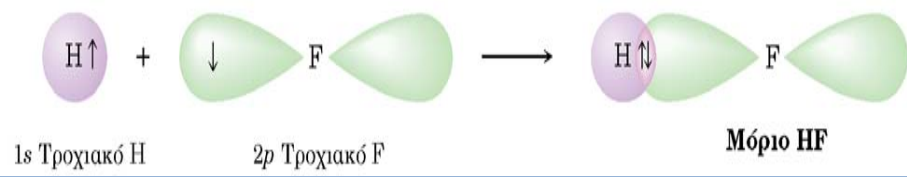
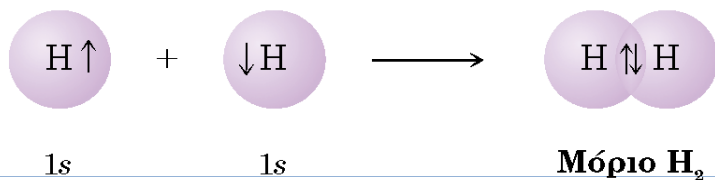
- Διαφορές ηλεκτραρνητικότητας (electronegativity) (HA): εκφράζουν ικανότητα ατόμου να έλκει e^- σε ομοιοπολικό δεσμό
- Διαφορές στην HA ατόμων δημιουργεί πολικούς δεσμούς
- HA C = 2.5
- Το F είναι το πιο HA άτομο (HA=4.0) το Cs το λιγότερο (HA=0.7)
- Τα μέταλλα στο αριστερό μέρος του Π.Π. ασκούν στα e^- ασθενή έλξη
- Τα αλογόνα στο δεξί μέρος του Π.Π. ασκούν ισχυρή έλξη

- Δεσμοί ανάμεσα σε άτομα με ίδιες τιμές ΗΑ = ομοιοπολικοί
- Δεσμοί ανάμεσα σε άτομα με διαφορά $HA < 2$ = πολικοί ομοιοπολικοί
- Δεσμοί ανάμεσα σε άτομα με διαφορά $HA > 2$ = ιοντικοί



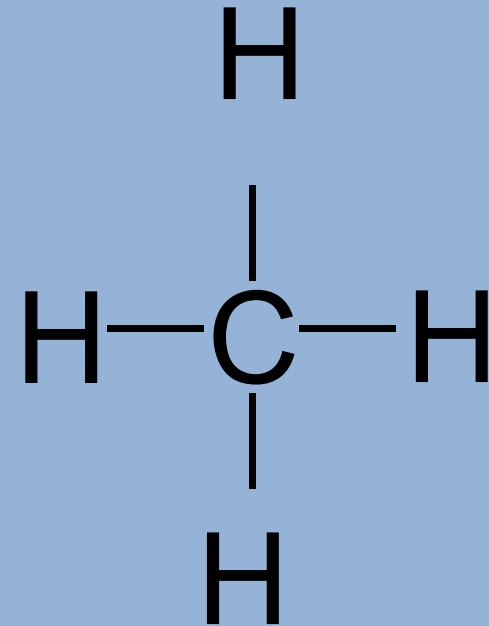
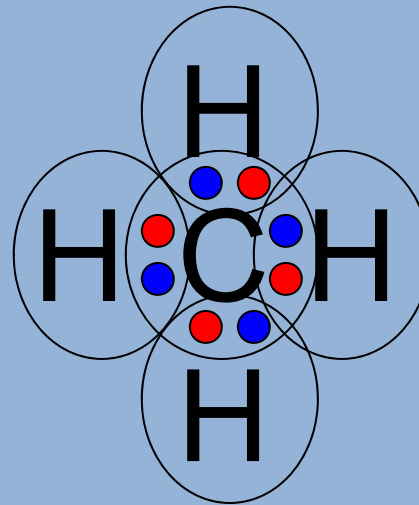
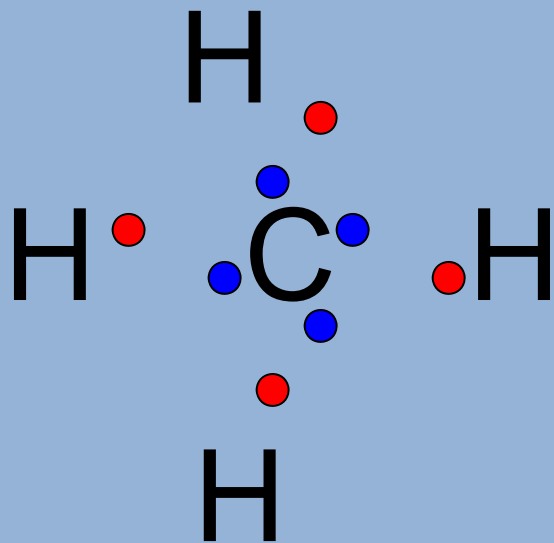
Ομοιοπολικοί και πολικοί ομοιοπολικοί δεσμοί: Ο κανόνας της οκτάδας

Ομοιοπολικοί δεσμοί σχηματίζονται όταν 2 άτομα πλησιάσουν το ένα το άλλο κοντά και το ημιπληρωμένο τροχιακό του ενός αλληλεπικαλύπτεται με το ημιπληρωμένο τροχιακό του άλλου



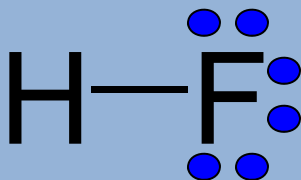
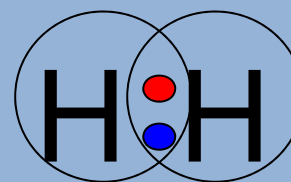
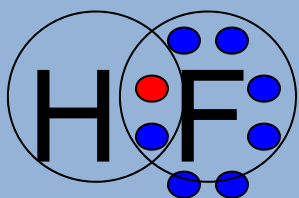
- Ισχύς δεσμού εξαρτάται από επικάλυψη
- Τα e⁻ στα αλληλοεπικαλυπτόμενα τροχιακά έλκονται από τους πυρήνες και των 2 ατόμων
 - Ο δεσμός H–H προέρχεται από την αλληλεπικάλυψη 2 ημιπληρωμένων τροχιακών 1s
 - Ο δεσμός H-F έχει κυλινδρική συμμετρία και ονομάζεται σίγμα(σ)

- Όλα τα στοιχεία έχουν τάση να αποκτήσουν δομή ευγενούς αερίου
- Όλα τα στοιχεία θέλουν να έχουν συμπληρωμένη την εξωτερική στιβάδα τους.
- Όλα τα στοιχεία θέλουν να έχουν **8 Ηλεκτρόνια**

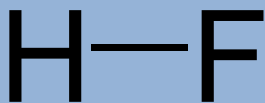
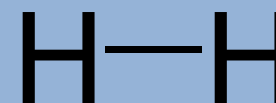




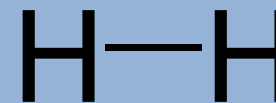
Όλα τα άτομα έχουν 8 ηλεκτρόνια στην εξωτερική στιβάδα (το H έχει μόνο 2 ηλεκτρόνια στην εξωτερική στιβάδα).



Lewis τύπος



Συντακτικός τύπος



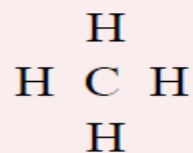
1. Δομή κατά Lewis. Τα e-σθένους ενός ατόμου παρίσταται με τελείες

2. Δομή κατά Kekulé. Ομοιοπολικός δεσμών 2 e-παρίσταται με μία γραμμή (-C-)

Οι δομές Lewis γράφονται ακολουθώντας απλούς κανόνες

Κανόνας 1. Γράψτε τον (δοθέντα ή επιθυμητό) μοριακό σκελετό.

Πάρτε παράδειγμα το μεθάνιο. Το μόριο έχει τέσσερα άτομα υδρογόνου συνδεδεμένα σε ένα κεντρικό άτομο άνθρακα.

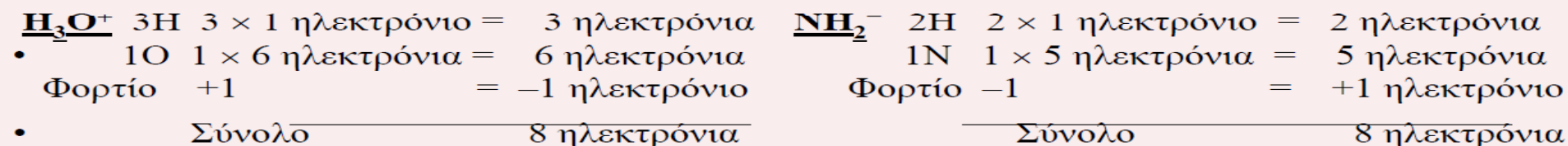
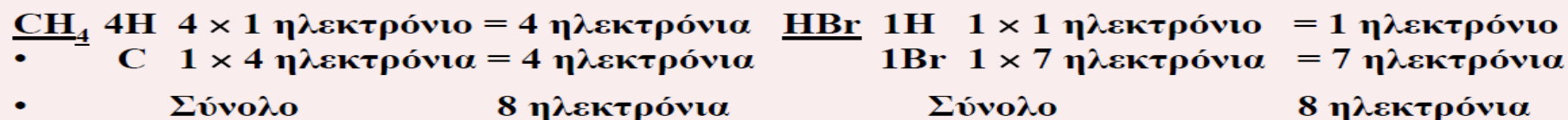


Σωστό

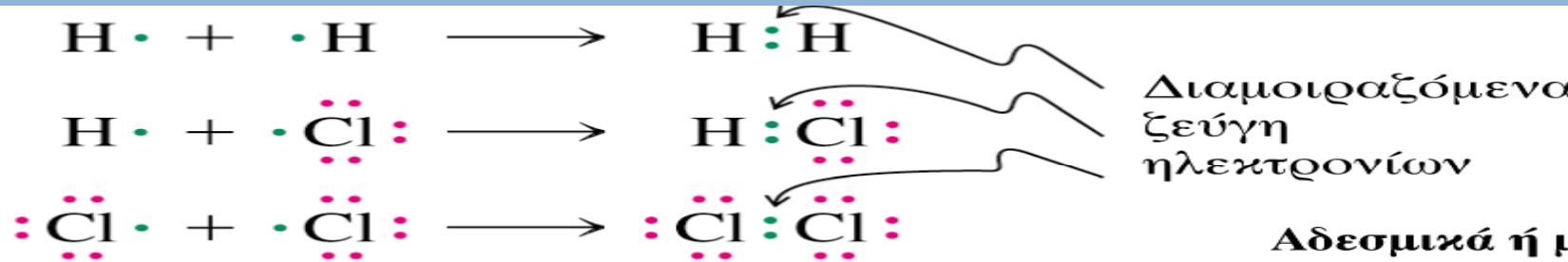


Λάθος

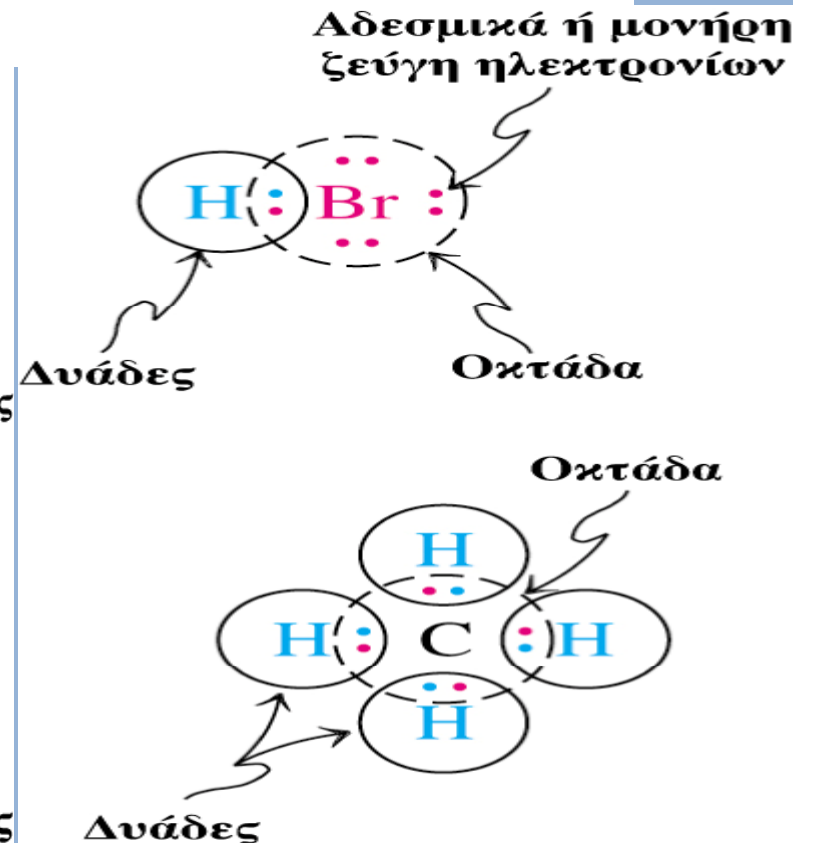
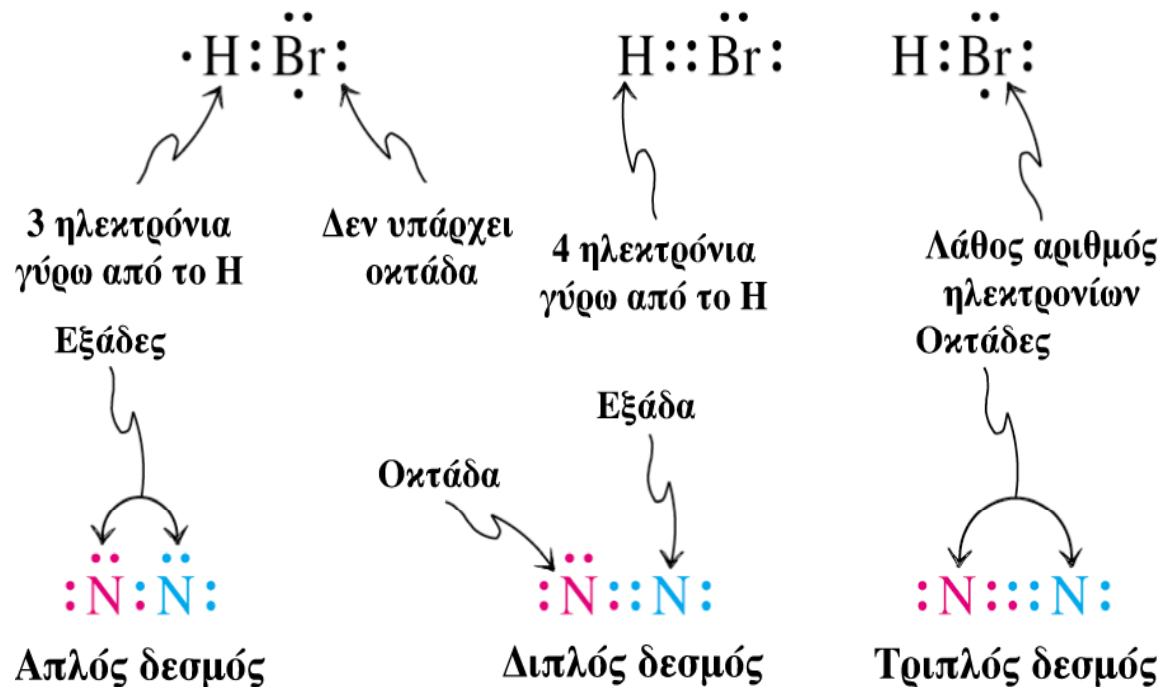
Κανόνας 2. Μετρήστε τον αριθμό των διαθέσιμων ηλεκτρονίων σθένους.



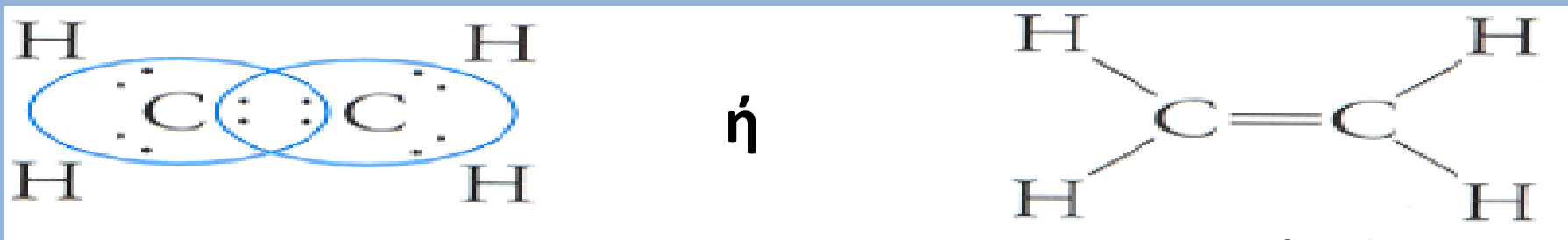
Κανόνας 3. (Κανόνας της οκτάδας) Γράψτε όλους τους ομοιοπολικούς δεσμούς με δύο κοινά, για τα δύο άτομα, ηλεκτρόνια, δίνοντας, γύρω από όσο περισσότερα άτομα γίνεται, οκτάδα ηλεκτρονίων, εκτός από τα άτομα του H, τα οποία χρειάζονται μόνο ένα ζεύγος.



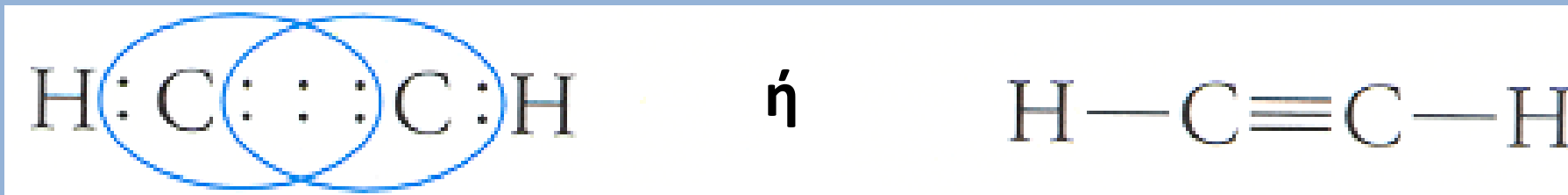
Λανθασμένες δομές Lewis



Εάν ένα άτομο έχει έλλειψη οκτάδας, χρησιμοποιούνται ηλεκτρονικά ζεύγη σε γειτονικό άτομο για να σχηματιστεί διπλός ή τριπλός δεσμός.



αιθυλένιο

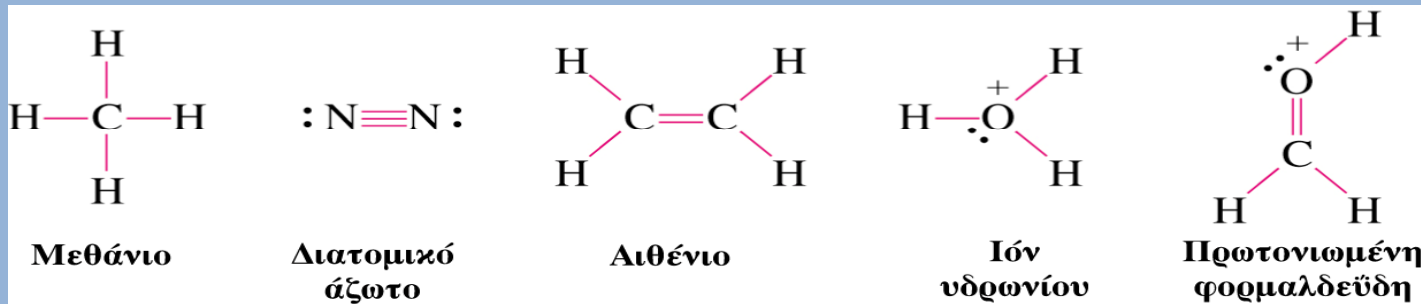


ακετυλένιο

Διπλοί δεσμοί: κυρίως τα άτομα C, N, O και S.

Τριπλοί δεσμοί: κυρίως τα άτομα C και N.

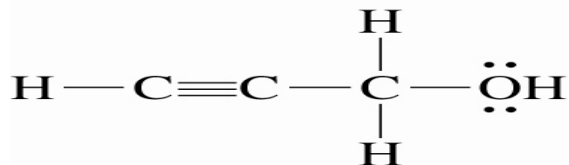
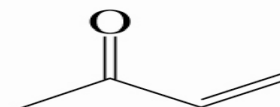
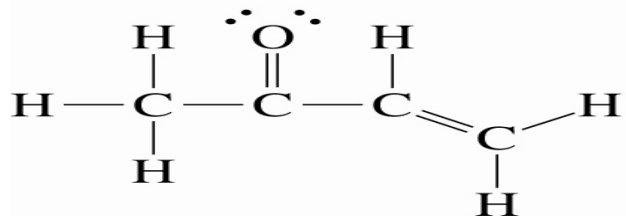
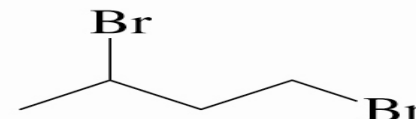
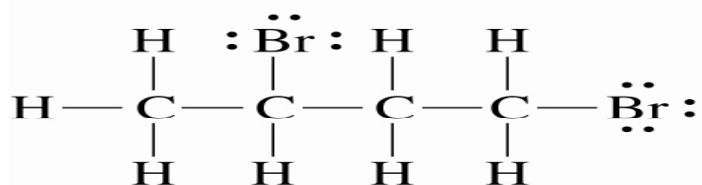
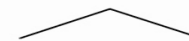
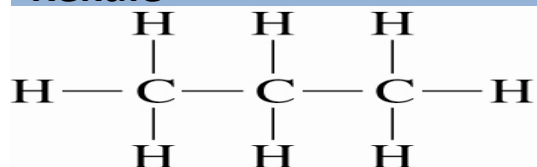
Απεικόνιση του ομοιοπολικού δεσμού με ευθείες γραμμές (Δομές Kekulé)



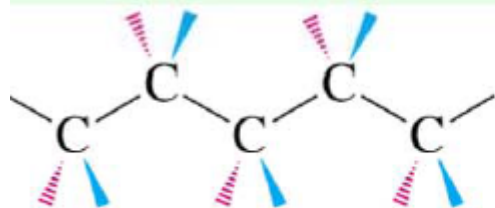
Kekulé

Συμπυκνωμένοι

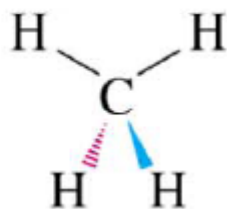
Δομή γραμμών-δεσμών



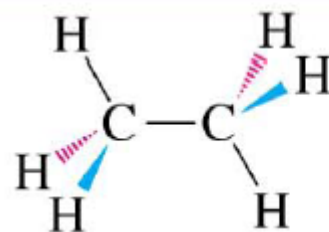
Απεικόνιση των δεσμών με διακεκομμένες (κόκκινο) σφηνοειδείς (μπλε) γραμμές



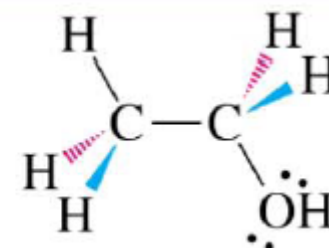
A



B



Γ



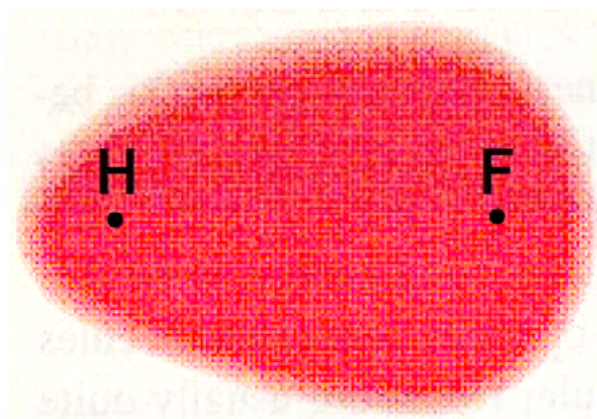
Δ

Σχήμα 1–23 Απεικόνιση των δεσμών με διακεκομμένες (κόκκινο) σφηνοειδείς (μπλε) γραμμές για (A) ανθρακική αλυσίδα· (B) αιθάνιο (Δ) αιθανόλη· και (E) μεθοξυμεθάνιο. Τα άτομα που κανονικές ευθείες γραμμές βρίσκονται στο επίπεδο της σελίδας στα άκρα των διακεκομμένων γραμμών βρίσκονται κάτω επίπεδο· οι ομάδες στα άκρα των σφηνοειδών γραμμών βρίσκονται

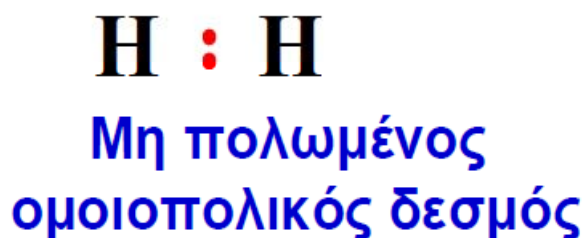
Πολωμένοι ομοιοπολικοί δεσμοί



Πολωμένος ομοιοπολικός δεσμός (ή απλά πολωμένος δεσμός) είναι ένας ομοιοπολικός δεσμός στον οποίο τα δεσμικά ηλεκτρόνια βρίσκονται πλησιέστερα στο ένα άτομο από ό,τι στο άλλο.



Κατανομή της ηλεκτρονικής πυκνότητας στο μόριο HF. Οι κουκίδες παριστάνουν τις θέσεις των δύο πυρήνων.



Ιδανικός ομοιοπολικός δεσμός: Δεσμοί μεταξύ ομοίων ατόμων.

H = 2.1

C = 2.5

Cl = 3.0

N = 3.0

O = 3.5

F = 4.5

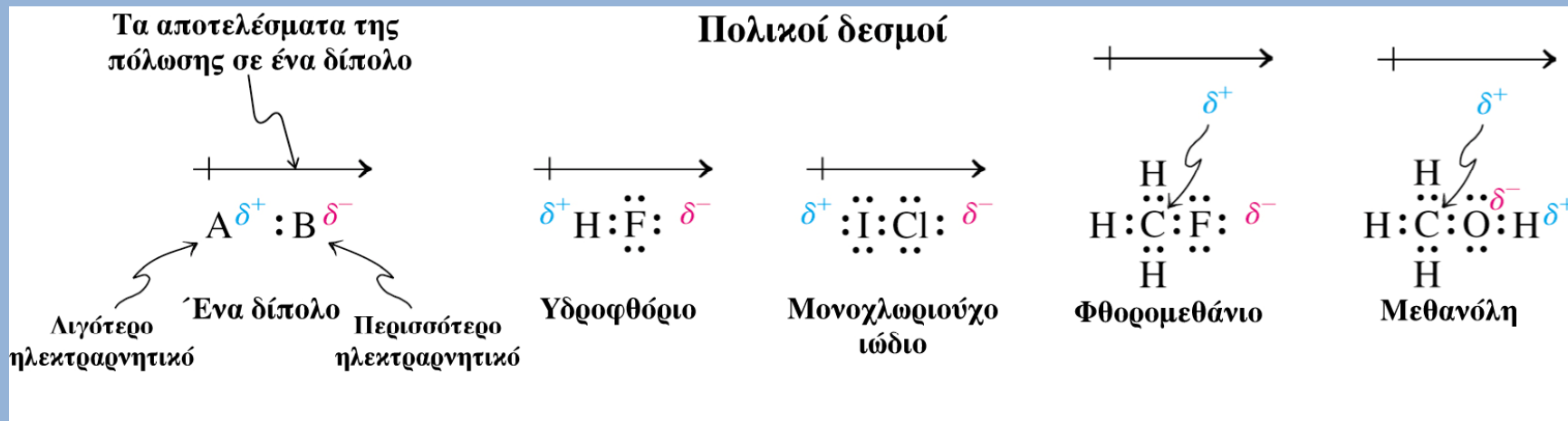
Li = 1.0

Ηλεκτραρνητικότητα: Η ικανότητα ενός ατόμου να έλκει ηλεκτρόνια από έναν ομοιοπολικό δεσμό.

Όσο μεγαλύτερη είναι η διαφορά στην ηλεκτραρνητικότητα τόσο πιο πλώμενος είναι ο δεσμός.

Αμελητέα πολικότητα στο δεσμό C-H (Τιμές ηλεκτραρνητικότητας παρόμοιες 2.5 και 2.1 αντίστοιχα)

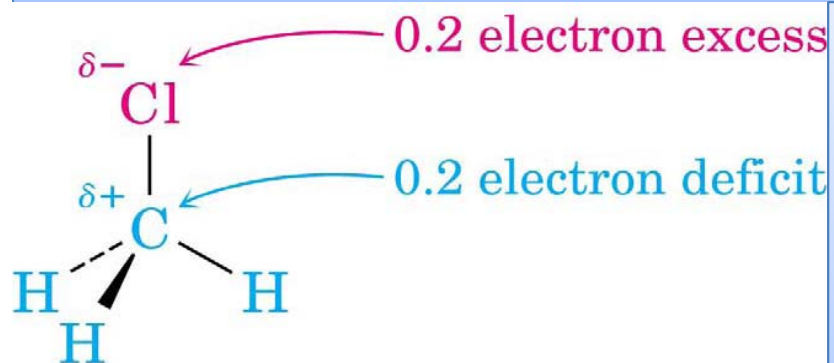
Ανάπτυξη κλασματικών φορτίων σε δεσμούς με άτομα διαφορετικής ηλεκτραρνητικότητας



Η συνολική πολικότητα ενός μορίου δίνεται από τη διπολική ροπή:
 $\mu = q \cdot r$ (Debye)

q = ηλεκτρικό φορτίο σε ηλεκτροστατικές μονάδες φορτίου esu, r = η απόσταση των δύο πόλων σε Å.

Διπολική ροπή = Μέγεθος διανυσματικό.



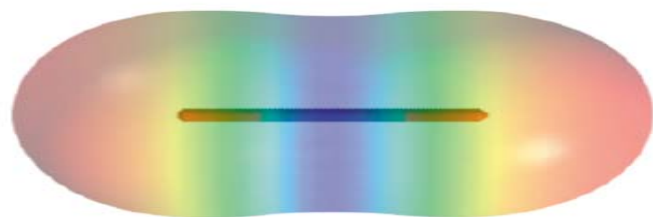
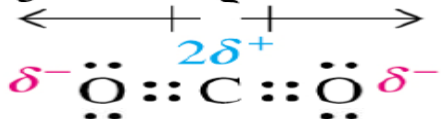
Chloromethane ($\mu = 1.87 \text{ D}$)

© Thomson - Brooks Cole

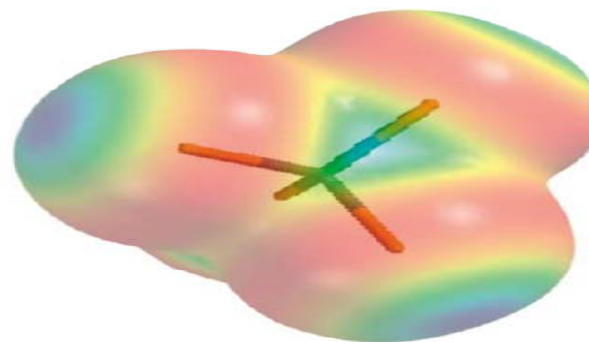
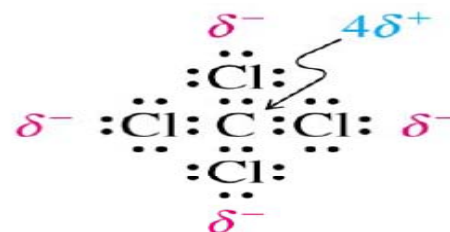
Μετρήσιμο μέγεθος στα πολικά μόρια που έχουν δεσμούς μεταξύ ατόμων διαφορετικής ηλεκτραρνητικότητας. Δεν είναι μετρήσιμο (αμελητέο) στα άπολα μόρια και σε πλήρως συμμετρικά πολικά μόρια.

Τα μόρια μπορεί να έχουν πολικούς δεσμούς, όχι όμως τελική πόλωση

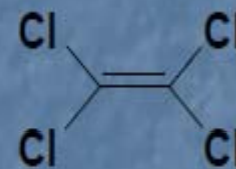
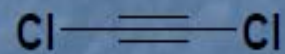
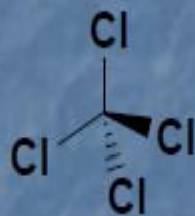
Τα δίπολα εξουδετερώνονται



Διοξείδιο του άνθρακα



Τετραχλωρομεθάνιο



Διαμοριακές Έλξεις

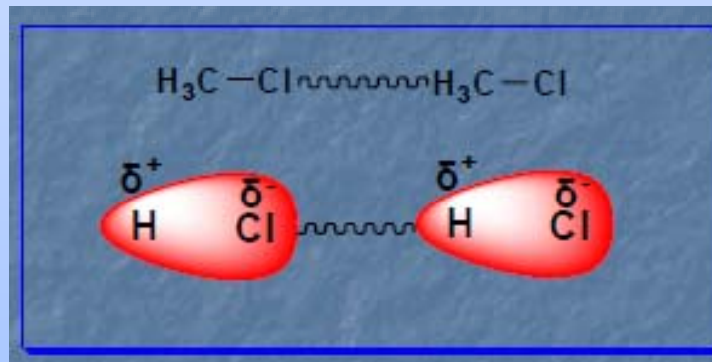
- Ασθενείς ελκτικές δυνάμεις που αναπτύσσονται μεταξύ των μορίων

Είδη διαμοριακών έλξεων

Δυνάμεις van der Waals

- Δυνάμεις διπόλου – διπόλου

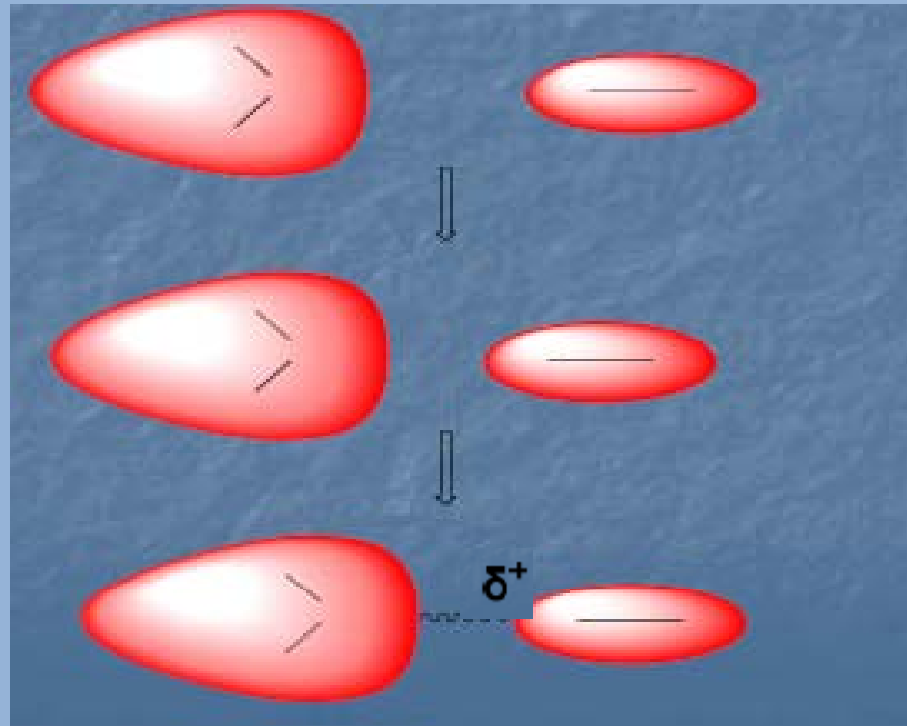
Δυνάμεις μεταξύ πολικών μορίων. Τα δίπολα των μορίων παίρνουν προσανατολισμούς με προσέγγιση του θετικού πόλου του ενός με τον αρνητικό πόλο του άλλου



Δυνάμεις van der Waals

- Δυνάμεις διπόλου – παροδικού διπόλου

Δυνάμεις που αναπτύσσονται μεταξύ πολικών και άπολων μορίων. Το πολικό μόριο πολώνει επαγωγικά και παροδικά το άπολο μόριο. Είναι ασθενέστερες από τις δυνάμεις διπόλου - διπόλου



- Δυνάμεις παροδικού διπόλου – παροδικού διπόλου ή Δυνάμεις διασποράς ή δυνάμεις London

Διαμοριακές ελκτικές δυνάμεις που αναπτύσσονται μεταξύ άπολων μορίων. Αναπτύσσονται ακόμη και μεταξύ των μορίων των ευγενών αερίων

Αύξηση πολικότητας



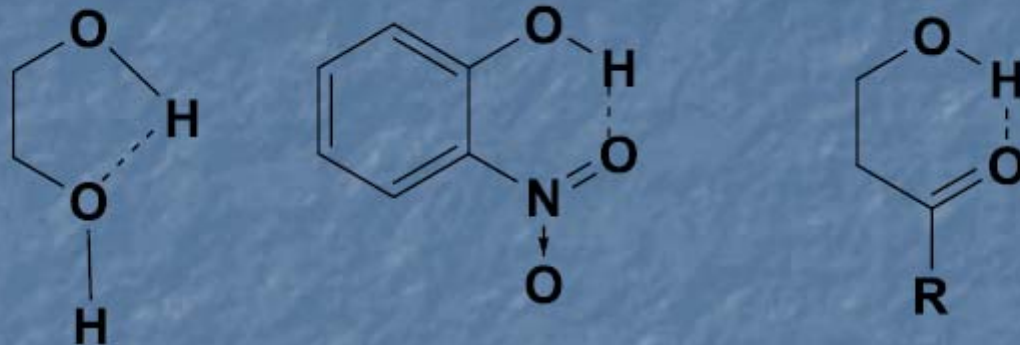
Επιδράσεις στις φυσικές ιδιότητες:

- (α) στο σ. ζέσεως
- (β) στην διαλυτότητα. *Similia similibus solvuntur*. Τα όμοια διαλύουν όμοια

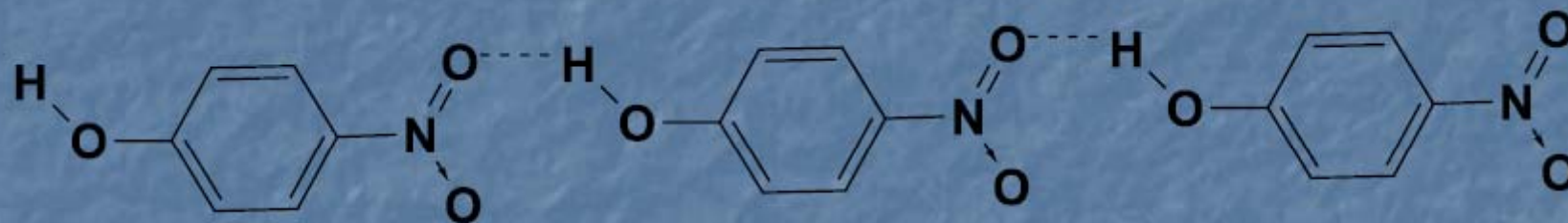
Δεσμοί υδρογόνου σε μεγάλα μόρια, πρωτεΐνες, νουκλεϊκά οξέα.

Αθροιστική δράση με συνέπεια την ισχυρή έλξη των μεγάλων μορίων μεταξύ τους. Δευτεροταγής δομή των πρωτεϊνών

**Η ισχύς του δεσμού υδρογόνου φθάνει
στο 5-10 % της ισχύος του ομοιοπολικού
δεσμού**



Ενδομοριακοί δεσμοί υδρογόνου



Διαμοριακοί δεσμοί υδρογόνου