

Τι είναι Χημεία;



**Χημεία είναι επιστήμη που ερευνά τις ιδιότητες της ύλης σε σχέση με τη μοριακή δομή της**

**Με άλλα λόγια:**

**Αντικείμενο της Χημείας είναι η συσχέτιση της μοριακής δομής της ύλης με τις ιδιότητές της**

- Η ύλη αποτελείται από άτομα και μόρια
- Τα άτομα δεν υπάρχουν ελεύθερα στη φύση (εκτός εξαιρέσεων) αλλά ενώνονται μεταξύ τους και σχηματίζουν μόρια
- Τα άτομα είναι οι δομικές μονάδες των στοιχείων και τα μόρια οι δομικές μονάδες των χημικών ενώσεων
- Η δύναμη που ενώνει δύο άτομα λέγεται δεσμός
- Όταν σχηματίζεται ένας δεσμός μεταξύ δύο Ατόμων, ελευθερώνεται ενέργεια

# Τι είναι Οργανική Χημεία;

Οργανική Χημεία είναι Χημεία των ενώσεων του άνθρακα (C).

Υπάρχουν κάπου 30 εκατομμύρια ενώσεις του C και μόνο μερικές εκατοντάδες χιλιάδες ενώσεις απ' όλα τα άλλα στοιχεία

Γιατί αυτή διαφορά;

- Κάθε άτομο άνθρακα (C) σχηματίζει 4 δεσμούς με άλλα άτομα
- Ένα άτομο του άνθρακα (C) έχει τη δυνατότητα να κάνει ισχυρούς δεσμούς με άλλα άτομα άνθρακα
- Σχηματίζει επίσης ισχυρούς δεσμούς με
- άλλα άτομα, όπως, H, N, O, P, F, Cl, S
- Τα παραπάνω δίνουν στον άνθρακα τη
- δυνατότητα να σχηματίζει μεγάλες
- «αλυσίδες» σε άπειρους συνδυασμούς

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															

**Σχήμα 1.1** Η θέση του άνθρακα στον περιοδικό πίνακα. Τα στοιχεία με κίτρινο χρώμα είναι εκείνα που συνήθως απαντούν στις οργανικές ενώσεις.



# Ατομική δομή-τροχιακά(orbitals)

## Το άτομο



Ο αριθμός των πρωτονίων ονομάζεται ατομικός αριθμός ( $Z$ ) και σε ένα ουδέτερο άτομο είναι ίσος με τον αριθμό των ηλεκτρονίων.

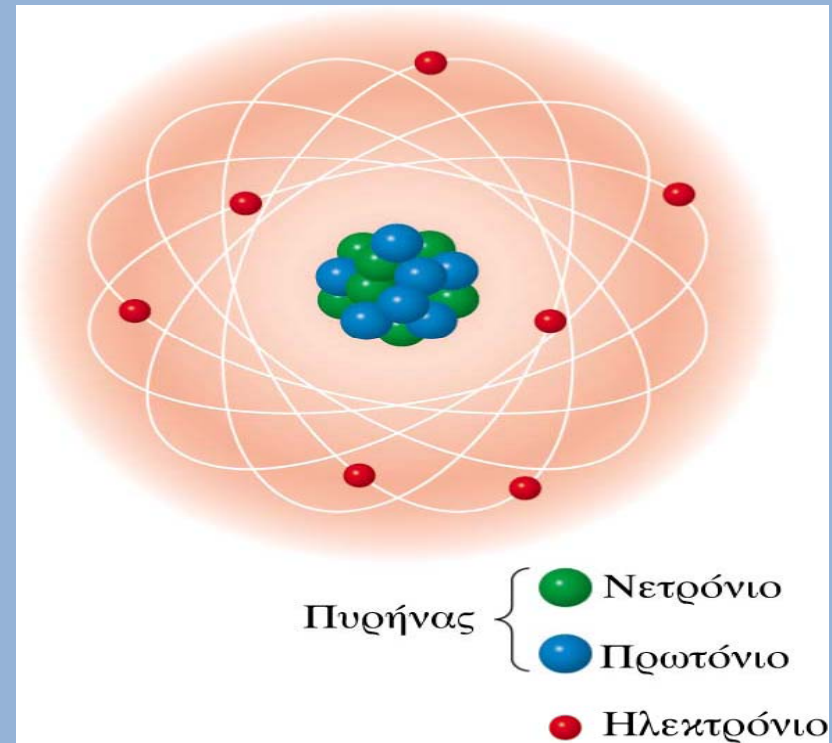
- το βάρος ενός ατόμου οφείλεται στον πυρήνα του
- ο όγκος καθορίζεται από τα ηλεκτρόνια



- Ατομικός αριθμός( $Z$ ) είναι ο αριθμός πρωτονίων που υπάρχει στον πυρήνα ενός ατόμου
- Μαζικός αριθμός( $A$ ) είναι ο συνολικός αριθμός των πρωτονίων και νετρονίων που υπάρχουν στον πυρήνα ενός ατόμου
- Όλα τα άτομα του ίδιου στοιχείου έχουν τον ίδιο ατομικό αριθμό
- Τα ισότοπα είναι άτομα του ίδιου στοιχείου που έχουν διαφορετικό αριθμό νετρονίων άρα και διαφορετικό μαζικό αριθμό
- Το ατομικό βάρος ενός στοιχείου είναι ο μέσος όρος των μαζικών αριθμών των διαφορετικών ισοτόπων του στοιχείου

**Ατομικά τροχιακά:** Η κίνηση ενός  $e^-$  γύρω από τον πυρήνα μπορεί να περιγραφεί ως κυματική εξίσωση, της οποίας η λύση ονομάζεται τροχιακό ( $\psi$ )

Το  $\psi^2$  προσδιορίζει την περιοχή του χώρου γύρω από τον πυρήνα στον οποίον είναι πιθανό να βρεθεί ένα  $e^-$

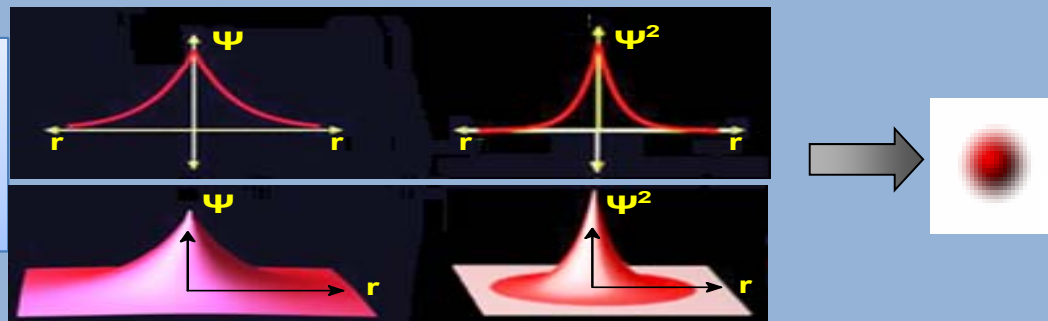


Τέσσερα διαφορετικά είδη τροχιακών **s**, **p**, **d**, και **f**

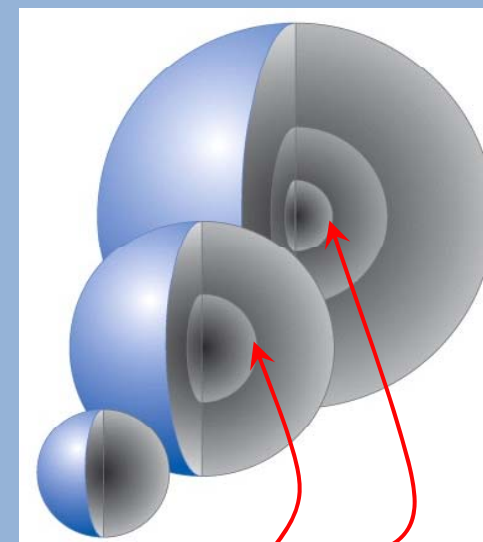
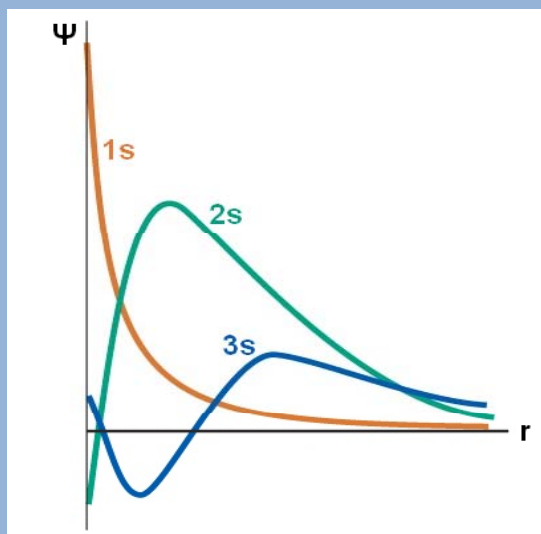
- **s** και **p** τροχιακά είναι τα πιο βασικά στην οργανική χημεία

- **s** τροχιακά: σφαιρικά, πυρήνας στο κέντρο

Γραφικές παραστάσεις της συνάρτησης  $\Psi$  και της πιθανότητας θέσης  $\psi^2$  του ηλεκτρονίου για το 1s.



Γραφικές παραστάσεις της κυματοσυνάρτησης  $\Psi$  για τα 1s, 2s, 3s τροχιακά.

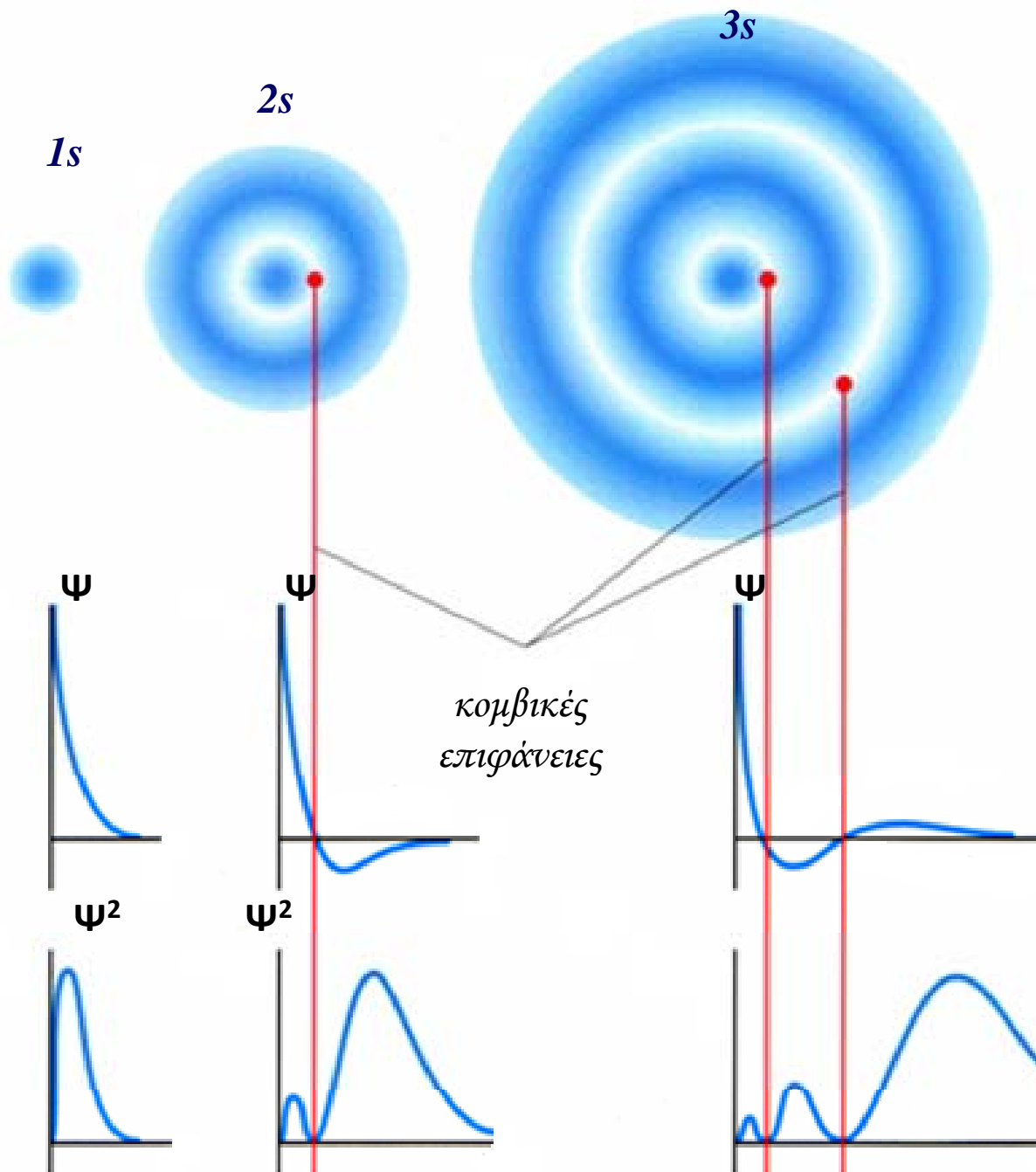


κομβικές επιφάνειες

Κομβικές επιφάνειες στα  
2s, 3s, τροχιακά

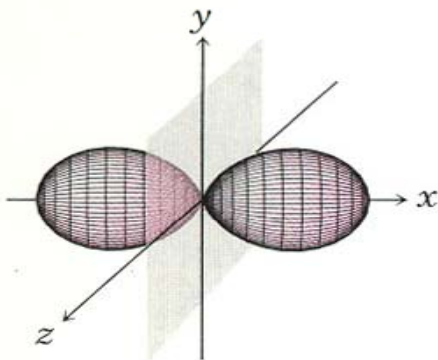
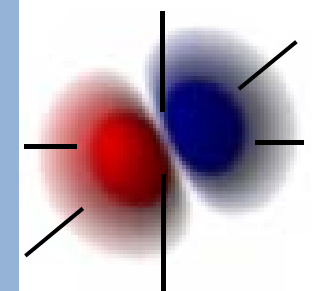
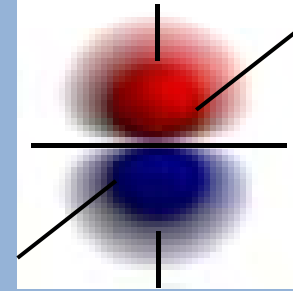
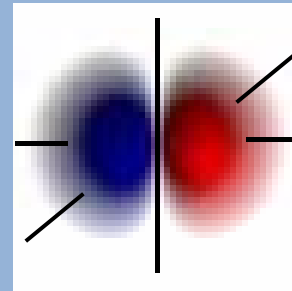
Γραφικές παραστάσεις  
της συνάρτησης  $\Psi$   
για τα 1s, 2s, 3s τροχιακά

Γραφικές παραστάσεις  
της συνάρτησης  $\Psi^2$   
για τα 1s, 2s, 3s τροχιακά.

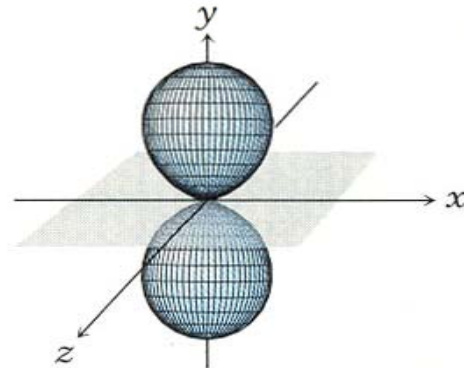


## Τα **p** τροχιακά

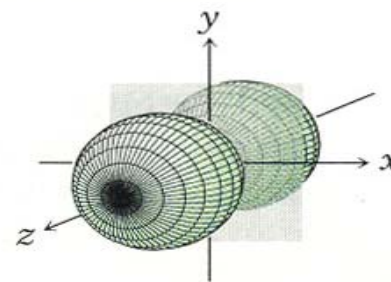
Τα  $p$  τροχιακά έχουν όλα σχήμα δύο λοβών. Ο ένας λοβός αντιστοιχεί στις θετικές τιμές της κυματοσυνάρτησης  $\Psi$  ενώ ο άλλος στις αρνητικές.



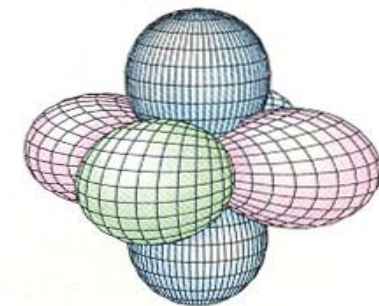
$2p_x$



$2p_y$



$2p_z$



3 τροχιακά  $2p$

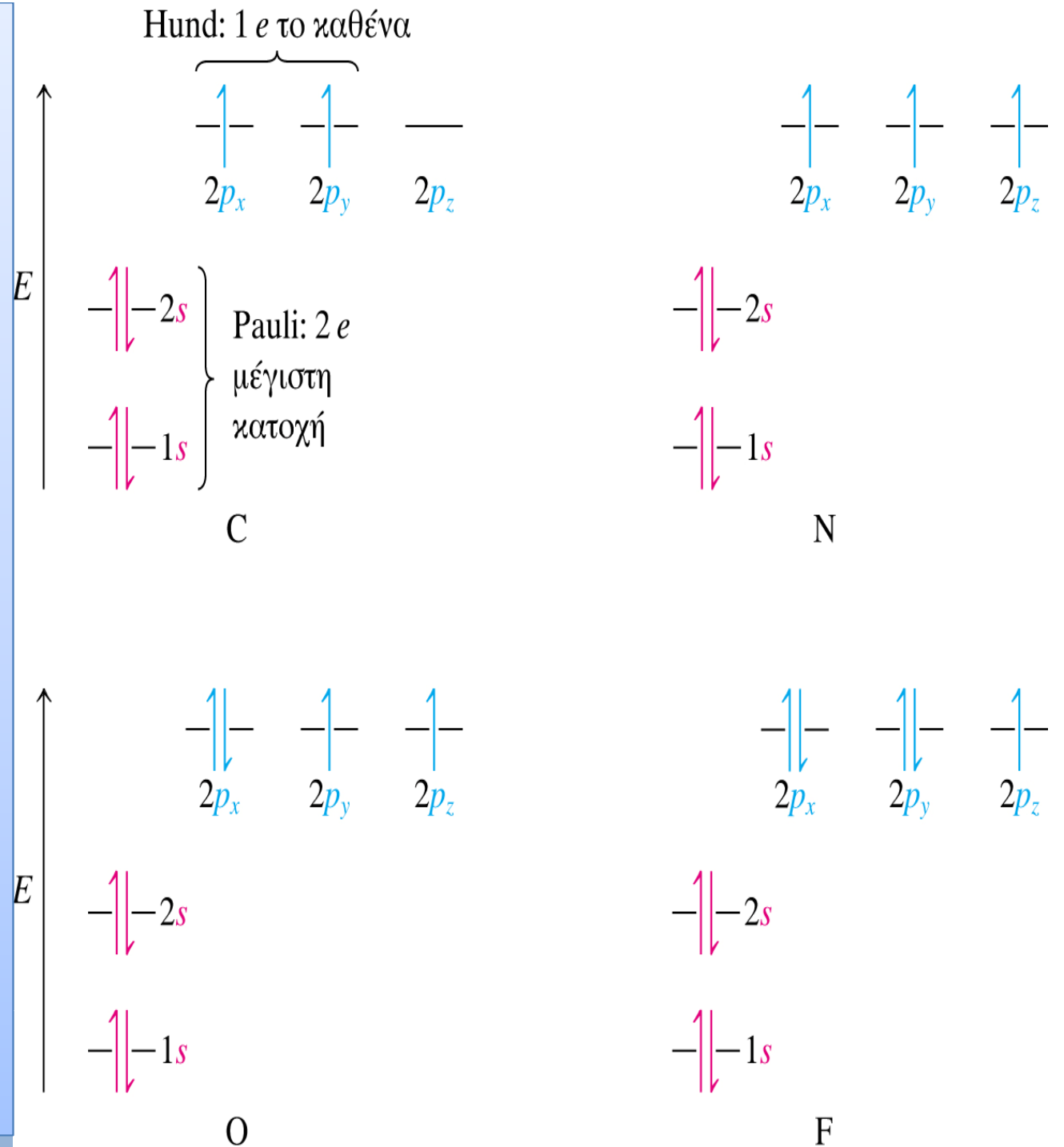
- Τα τροχιακά είναι κατανεμημένα σε στιβάδες(shells) αυξανόμενου μεγέθους και ενέργειας
- Διαφορετικές στιβάδες περιέχουν διαφορετικό αριθμό και είδος τροχιακών
- Κάθε τροχιακό μπορεί να συγκρατήσει μέχρι  $2 e^-$
- Η πρώτη στιβάδα περιέχει ένα τροχιακό  $s$  ( $1s$ ) ( $2 e^-$ )
- Η δεύτερη στιβάδα περιέχει ένα  $s$  τροχιακό( $2s$ ) και τρία  $p$  τροχιακά ( $2p$ ), ( $8 e^-$ )
- Η τρίτη στιβάδα περιέχει ένα  $s$  τροχιακό( $3s$ ), τρία  $p$  τροχιακά( $3p$ ), και πέντε  $d$  τροχιακά( $3d$ ),( $18 e^-$ )

- Πρώτα καταλαμβάνονται τα χαμηλότερης ενέργειας τροχιακά
- Μόνο  $2 e^-$  (αντιθέτου σπιν) μπορούν να καταλάβουν ένα τροχιακό (κανόνας του *Hund*)
- Τα κενά τροχιακά ίδιας ενέργειας συμπληρώνονται έτσι ώστε, αρχικά κάθε ένα τροχιακό να έχει από ένα  $e^-$  παράλληλου σπιν

Οι πιο σταθερές ηλεκτρονικές διαμορφώσεις για τον άνθρακα,  $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ , το άζωτο,  $(1s)^2(2s)^2(2p)^3$ , το οξυγόνο,  $(1s)^2(2s)^2(2p)^4$  και το φθόριο  $(1s)^2(2s)^2(2p)^5$ .

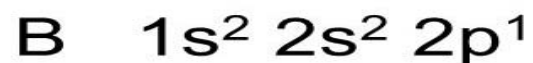
Σημειώστε ότι τα spin των μονήρων ηλεκτρονίων στα p τροχιακά είναι σύμφωνα με τον κανόνα του Hund, και τα spin των ζευγών των ηλεκτρονικών στα συμπληρωμένα 1s και 2s τροχιακά είναι σύμφωνα με την αρχή του Pauli και τον κανόνα Hund.

Η σειρά της συμπλήρωσης των p τροχιακών επελέγη τυχαία ως  $p_x$ ,  $p_y$  και τέλος  $p_z$ . Οποιαδήποτε άλλη σειρά θα ήταν εξίσου καλή.

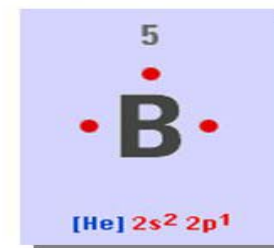


# ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΑ ΣΘΕΝΟΥΣ

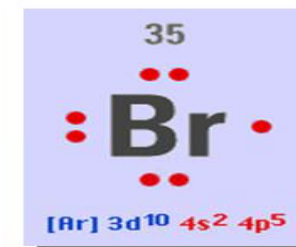
Τα ηλεκτρόνια της εξωτερικής στιβάδας λέγονται και Ηλεκτρόνια σθένους



Στιβάδα σθένους =  $2s^2 2p^1$



Στιβάδα σθένους =  $4s^2 4p^5$



## Το άτομο του άνθρακα

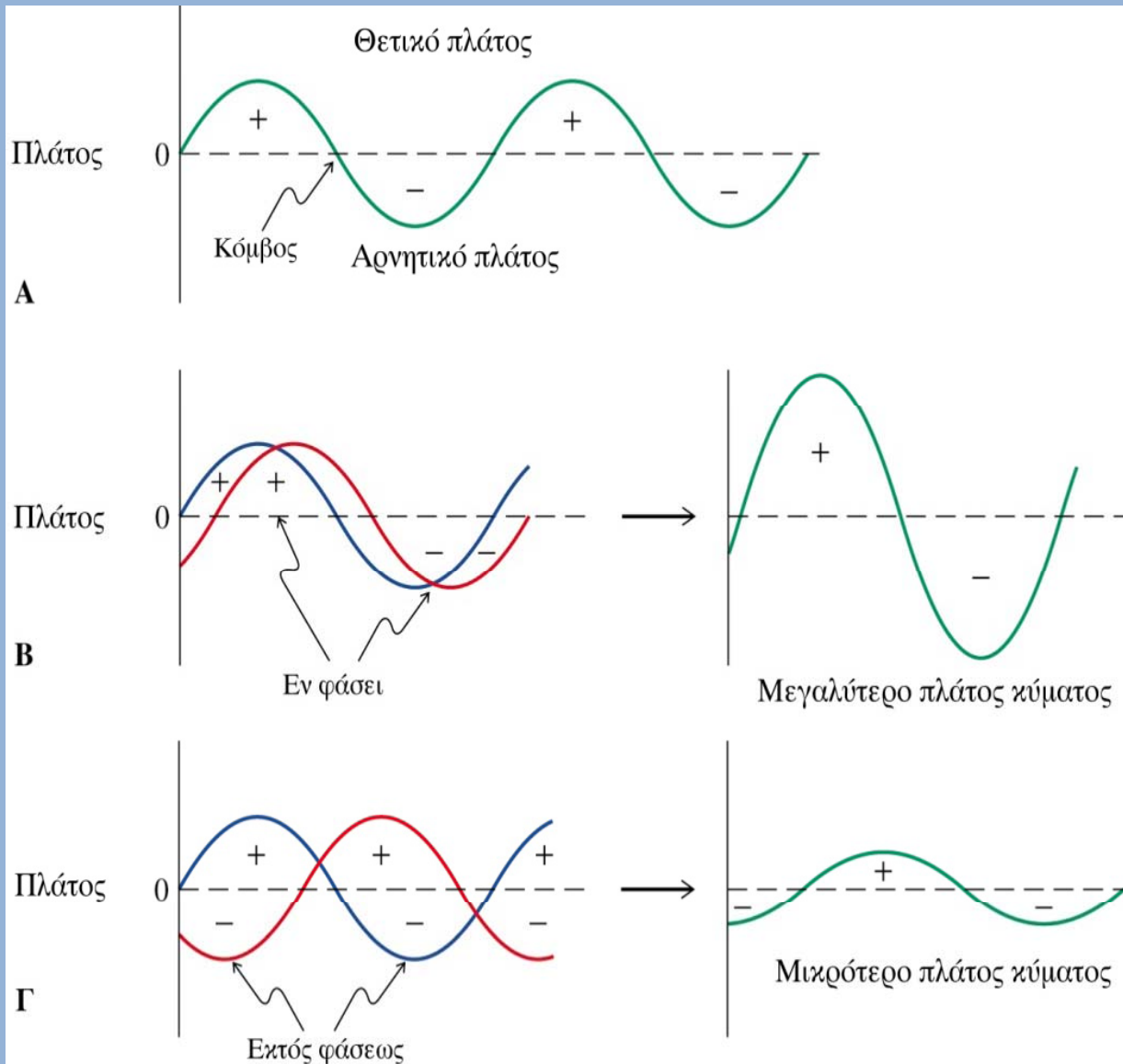
Συμπληρωμένη 1η στιβάδα



Ασυμπλήρωτη 2η στιβάδα:  
τέσσερα ηλεκτρόνια σθένους



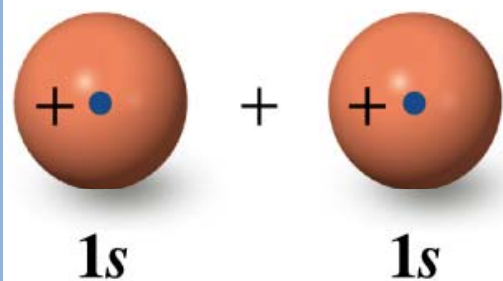
# Μοριακά τροχιακά και ομοιοπολική δεσμικότητα εν φάσει(δεσμικός) και εκτός φάσεως (αντιδεσμικός) συνδυασμός των 1s ατομικών τροχιακών.



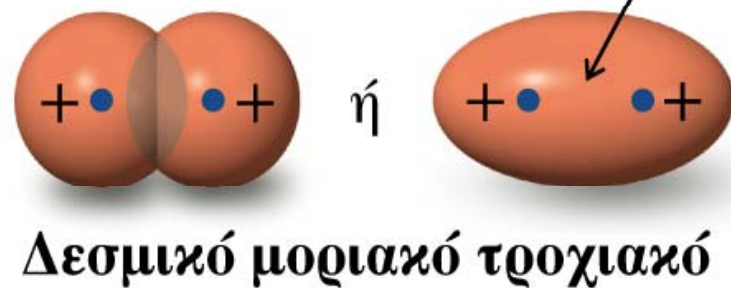
(Α) Ένα κύμα. Τα πρόσημα του πλάτους τέθηκαν αυθαίρετα. Στα σημεία μηδενικής έντασης, που ονομάζονται κόμβοι, τα κύματα αλλάζουν πρόσημο.

(Β) Κύματα με πλάτη του ίδιου πρόσημου (της αυτής φάσεως) ενισχύουν το ένα το άλλο, σχηματίζοντας ένα μεγαλύτερο κύμα.

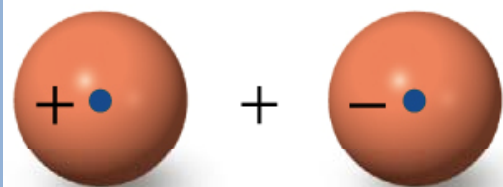
(Γ) Κύματα εκτός φάσεως αφαιρούνται μεταξύ τους, σχηματίζοντας ένα μικρότερο κύμα.



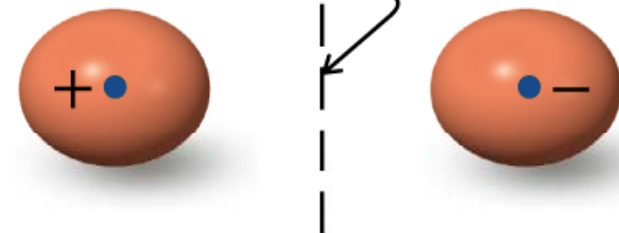
Εν φάσει →



Υψηλή ηλεκτρονική πυκνότητα



Εκτός φάσεως →



Κόμβος



Μηδενική ηλεκτρονική πυκνότητα