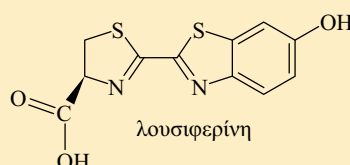


λουσιφερίνη



λουσιφερίνη

Στόχοι Κεφαλαίου 1

1. Ανασκόπηση των εννοιών της γενικής χημείας που είναι απαραίτητες για την επιτυχία στην οργανική χημεία, όπως η ηλεκτρονική δομή του ατόμου, οι δομές του Lewis και ο κανόνας των οκτάδων, τύποι δεσμών, ηλεκτραρνητικότητα και τυπικά φορτία.
2. Πρόβλεψη μοντέλων ομοιοπολικών και ιοντικών δεσμών που περιλαμβάνουν C, H, O, N και αλογόνα.
3. Προσδιορισμός των σταθερότερων δομών συντονισμού και σύγκριση της σχετικής σημασίας των μορφών συντονισμού τους.
4. Σχεδιασμός και ερμηνεία των συντακτικών τύπων που χρησιμοποιούνται συνήθως στην οργανική χημεία, συμπεριλαμβανομένων των συμπυκνωμένων δομών, καθώς και των σκελετικών δομών.
5. Πρόβλεψη του υβριδισμού και της γεωμετρίας των οργανικών μορίων βασισμένοι στη δομή τους.
6. Προσδιορισμός ισομερών και επεξήγηση των διαφορών μεταξύ τους.

Η **Λουσιφερίνη** είναι η ένωση που εκπέμπει φως και βρίσκεται σε πολλά είδη πυγολαμπίδων (Lampyridae). Η Λουσιφερίνη αντιδρά με το ατμοσφαιρικό οξυγόνο, υπό τον έλεγχο ενός ενζύμου, για να εκπέμπει το κίτρινο φως που χρησιμοποιούν οι πυγολαμπίδες για να προσελκύσουν συντρόφους ή θύματα.

1-1 Η Προέλευση της Οργανικής Χημείας

Ορίζουμε σήμερα την οργανική χημεία ως τη *χημεία των ενώσεων του άνθρακα*. Γιατί ο άνθρακας θεωρείται τόσο σημαντικός, ώστε ένας ολόκληρος κλάδος χημείας να αναφέρεται στις ενώσεις του; Αντίθετα από τα περισσότερα στοιχεία, ο άνθρακας σχηματίζει ισχυρούς δεσμούς με άλλα άτομα άνθρακα αλλά και με πλήθος άλλων στοιχείων. Αλυσίδες και δακτύλιοι ατόμων άνθρακα σχηματίζουν μία ατέλειωτη ποικιλία μορίων. Αυτή η ποικιλία των ενώσεων του άνθρακα αποτελεί τη βάση της ζωής στη γη. Οι ζωντανοί οργανισμοί αποτελούνται, σε μεγάλο βαθμό, από πολύπλοκες οργανικές ενώσεις με δομικές, χημικές ή γενετικές λειτουργίες.

Ο όρος **οργανικός** κυριολεκτικά σημαίνει «προερχόμενος από ζώντες οργανισμούς». Αρχικά, η επιστήμη της οργανικής χημείας μελετούσε ενώσεις, οι οποίες λαμβάνονταν από ζωντανούς οργανισμούς και από τα φυσικά τους προϊόντα.

Ενώσεις όπως τα σάκχαρα, η ουρία, το άμυλο, οι κηροί και τα φυτικά έλαια θεωρούνταν «οργανικά» ενώ οι άνθρωποι πίστευαν στη **Βιταλιστική Θεωρία**, σύμφωνα με την οποία, για τη δημιουργία των φυσικών προϊόντων είναι απαραίτητη η «ζωική δύναμη». Έτσι, η οργανική χημεία μελετούσε τις ενώσεις που περιείχαν τη ζωική αυτή δύναμη. Η ανόργανη χημεία, μελετούσε τα αέρια, τα πετρώματα και τα ορυκτά καθώς και τις ενώσεις που μπορούσαν να ληφθούν από αυτά.

Κατά το δέκατο ένατο αιώνα, αποδείχτηκε πειραματικά, ότι οι οργανικές ενώσεις μπορούν να συντεθούν από ανόργανες ενώσεις. Το 1828 ο Γερμανός χημικός Friedrich Wöhler μετέτρεψε κυανικό αμμώνιο, το οποίο παρασκευάζεται από αμμωνία και κυανικό οξύ, σε ουρία, με απλή θέρμανση, απουσία οξυγόνου.



Η ουρία ήταν πάντα οργανικής προέλευσης και θεωρητικά περιείχε τη ζωική δύναμη, το κυανικό αμμώνιο, όμως, είναι ανόργανη ένωση και επομένως στερείται ζωικής δύναμης. Μερικοί χημικοί ισχυρίστηκαν ότι ίχνη ζωικής δύναμης από τα χέρια του Wöhler, μεταφέρθηκαν στο μίγμα της αντίδρασης, αλλά οι περισσότεροι παραδέχτηκαν τη δυνατότητα σύνθεσης οργανικών ενώσεων από ανόργανες. Μετά από πολλές άλλες συνθέσεις, η θεωρία της ζωικής δύναμης τελικά καταρρίφθηκε.

Μετά τη διάγνωση της Βιταλιστικής Θεωρίας κατά τον δέκατο ένατο αιώνα, θα πίστευε κάποιος ότι μέχρι σήμερα θα έχει εγκαταλειφθεί εντελώς. Και θα έκανε λάθος! Η Βιταλιστική Θεωρία συνεχίζει να ζει στο μυαλό αυτών που πιστεύουν ότι οι «φυσικές» (προερχόμενες από φυτά) βιταμίνες, οι ενώσεις που προσδίδουν ευχάριστη οσμή κ.ά., είναι κατά κάποιο τρόπο διαφορετικές και περισσότερο υγιεινές από τις ταυτόσημες «τεχνητές» (συνθετικές) ενώσεις.

Εφαρμογή: Φαρμακευτική Έρευνα

Ένας από τους λόγους για τους οποίους οι χημικοί συνθέτουν παράγωγα πολύπλοκων οργανικών ενώσεων όπως η μορφίνη είναι για να ανακαλύψουν νέα φάρμακα τα οποία διατηρούν τις χρήσιμες ιδιότητες (πιθανά αναλγητικά) αλλά όχι τις επιβλαβείς (έντονα εθιστικά).

Ως χημικοί, γνωρίζουμε ότι οι ενώσεις που προέρχονται από φυτά είναι ταυτόσημες με τις συνθετικές. Με την προϋπόθεση ότι είναι καθαρές, ο μόνος τρόπος να τις διακρίνουμε είναι μέσω της χρονολόγησης με ^{14}C : Οι ενώσεις οι οποίες παρασκευάζονται από πετροχημικά προϊόντα, περιέχουν λιγότερο ραδιενεργό ^{14}C και φαίνονται παλαιότερες, επειδή ο ^{14}C έχει διασπασθεί με το πέρασμα του χρόνου. Οι ενώσεις φυτικής προέλευσης παρασκευάστηκαν πρόσφατα από το CO_2 του αέρα. Έχουν υψηλότερο περιεχόμενο σε ραδιενεργό ^{14}C . Ορισμένες μεγάλες χημικές βιομηχανίες παρέχουν αναλύσεις αναλογιών ισοτόπων, ώστε να αποδείξουν ότι τα «φυσικά» τους προϊόντα έχουν υψηλό περιεχόμενο σε ^{14}C και είναι φυτικής προέλευσης. Αυτού του είδους η εξεζητημένη ανάλυση χαρίζει ένα άρωμα υψηλής τεχνολογίας σε αυτήν την εικοστού-πρώτου αιώνα μορφή της Βιταλιστικής Θεωρίας.

Αν και οι οργανικές ενώσεις δεν απαιτούν καμία ζωική δύναμη, μπορούν να διακριθούν από τις ανόργανες. Το ευδιάκριτο χαρακτηριστικό των οργανικών ενώσεων είναι ότι όλες περιέχουν ένα ή περισσότερα άτομα άνθρακα. Παρ' όλα αυτά όλες οι ενώσεις που περιέχουν άνθρακα, δεν είναι οργανικές. Ενώσεις όπως το διαμάντι, ο γραφίτης, το διοξείδιο του άνθρακα, το κυανικό αμμώνιο και το ανθρακικό αμμώνιο λαμβάνονται από ορυκτά και παρουσιάζουν χαρακτηριστικές ανόργανες ιδιότητες. Ωστόσο, οι περισσότερες από τα εκατομμύρια των ενώσεων του άνθρακα ταξινομούνται ως οργανικές.

Εμείς οι άνθρωποι αποτελούμαστε κατά ένα μεγάλο μέρος από οργανικά μόρια, ενώ τρεφόμαστε με τα οργανικά μόρια των τροφών μας. Οι πρωτεΐνες του δέρματός μας, τα λιπίδια στις μεμβράνες των κυττάρων μας, το γλυκογόνο του ήπατός μας, αλλά και το DNA στους πυρήνες των κυττάρων μας, είναι όλες οργανικές ενώσεις. Το σώμα μας ρυθμίζεται και αμύνεται με πολύπλοκα οργανικά μόρια.

Οι χημικοί έμαθαν να συνθέτουν και να εξομοιώνουν πολλά από τα πολύπλοκα αυτά μόρια. Τα συνθετικά προϊόντα χρησιμοποιούνται ως δρόγες, φάρμακα, πλαστικά, εντομοκτόνα, χρώματα και υφάσματα. Η πρόοδος της ιατρικής, οφείλεται σε μεγάλο βαθμό, στην πρόοδο της οργανικής χημείας. Νέες συνθετικές φαρμακευτικές ουσίες σχεδιάζονται για την αντιμετώπιση ασθενειών ενώ νέα πολυμερή διαμορφώνονται με σκοπό την αντικατάσταση μη ικανοποιητικών οργάνων. Η οργανική χημεία, έχει διαγράψει έναν πλήρη κύκλο. Ξεκίνησε ως η μελέτη των ενώσεων που προέρχονται από «όργανα» και τώρα πια μας παρέχει τα φάρμακα και τα υλικά για να επουλώσουμε ή να αντικαταστήσουμε τα όργανα αυτά.



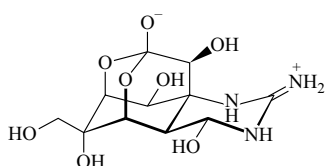
Η κλειστή τεχνητή καρδιά Abiomed, η οποία εμφυτεύτηκε για πρώτη φορά στις 2 Ιουλίου 2001. Το εξωτερικό περίβλημα είναι πολυκαρβονικό, ενώ οι βαλβίδες και η εσωτερική κοιλία είναι από πολυουρεθάνη.

1-2 Αρχές της Δομής του Ατόμου

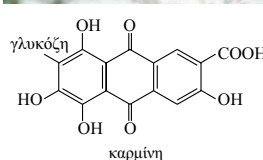
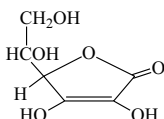
Πριν μελετήσουμε την οργανική χημεία, θα ξεκινήσουμε με μία επισκόπηση ορισμένων βασικών αρχών. Οι έννοιες της ατομικής και μοριακής δομής είναι κρίσιμες για την κατανόηση της δομής και των δεσμών των οργανικών ενώσεων.



τετροδοτοξίνη



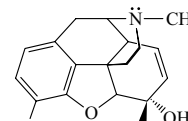
βιταμίνη C



καρμίνη



μορφίνη



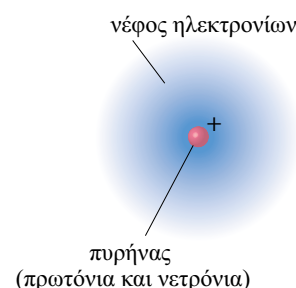
ΣΧΗΜΑ 1-1

(α) Το δηλητήριο του χταποδιού με τους μπλε δακτυλίους, περιέχει τετροδοτοξίνη, που προκαλεί παράλυση και οδηγεί σε θάνατο. (β) Οι καρποί της αγριοτριανταφυλιάς περιέχουν βιταμίνη C, έναν αναστολέα ριζών (Κεφάλαιο 4) απαραίτητη για την πρόληψη του σκορβούτου. (γ) Η κόκκινη χρωστική καρμίνης προέρχεται από έντομα κοκινεάλης που απαντώνται σε φραγκοσουκιές (Κεφάλαιο 15). (δ) Οι παπαρούνες οπίου περιέχουν μορφίνη, ένα αναλγητικό, εθιστικό αλκαλοειδές (Κεφάλαιο 19).

1-2Α Δομή του Ατόμου

Τα άτομα αποτελούνται από πρωτόνια, νετρόνια και ηλεκτρόνια. Τα πρωτόνια είναι θετικά φορτισμένα και βρίσκονται μαζί με τα (αφόρτιστα) νετρόνια στον πυρήνα. Τα ηλεκτρόνια, τα οποία φέρουν αρνητικό φορτίο ίσο σε μέγεθος με το θετικό φορτίο των πρωτονίων, καταλαμβάνουν τον χώρο που περιβάλλει τον πυρήνα (Σχήμα 1-1). Τα πρωτόνια και τα νετρόνια έχουν παραπλήσιες μάζες, σχεδόν 1800 φορές μεγαλύτερη από τη μάζα του ηλεκτρονίου. Σχεδόν το σύνολο της μάζας του ατόμου βρίσκεται στον πυρήνα, τα ηλεκτρόνια όμως είναι αυτά που συμμετέχουν στους χημικούς δεσμούς και στις αντιδράσεις.

Κάθε στοιχείο διακρίνεται από τον αριθμό των πρωτονίων του πυρήνα του (τον ατομικό αριθμό). Ο αριθμός των νετρονίων είναι συνήθως ίσος με τον αριθμό των πρωτονίων, αν και ο αριθμός των νετρονίων μπορεί να ποικίλλει. Άτομα με τον ίδιο αριθμό πρωτονίων αλλά διαφορετικό αριθμό νετρονίων ονομάζονται **ισότοπα**. Για παράδειγμα, ο πιο κοινός τύπος ατόμου άνθρακα έχει έξι πρωτόνια και έξι νετρόνια στον πυρήνα του. Ο μαζικός του αριθμός (το άθροισμα των πρωτονίων και των νετρονίων) ισούται με 12 και συμβολίζεται ^{12}C . Περίπου το 1% των ατόμων άνθρακα φέρει επτά νετρόνια. Ο μαζικός αριθμός ισούται με 13 και γράφουμε ^{13}C . Ένα πολύ μικρό ποσοστό ατόμων άνθρακα έχει οκτώ νετρόνια και μαζικό αριθμό 14. Το ισότοπο ^{14}C είναι ραδιενεργό, με χρόνο ημιζωής (χρόνος που απαιτείται για τη διάσπαση των μισών πυρήνων) ίσο με 5730 χρόνια. Η προβλεπόμενη διάσπαση του ^{14}C χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της ηλικίας οργανικών υλικών ηλικίας έως και 50,000 ετών.



ΣΧΗΜΑ 1-2

Βασική ατομική δομή. Το άτομο φέρει έναν πυκνό, θετικά φορτισμένο πυρήνα ο οποίος περιβάλλεται από το ηλεκτρονικό νέφος.

1-2Β Ηλεκτρονικές Στιβάδες και Τροχιακά

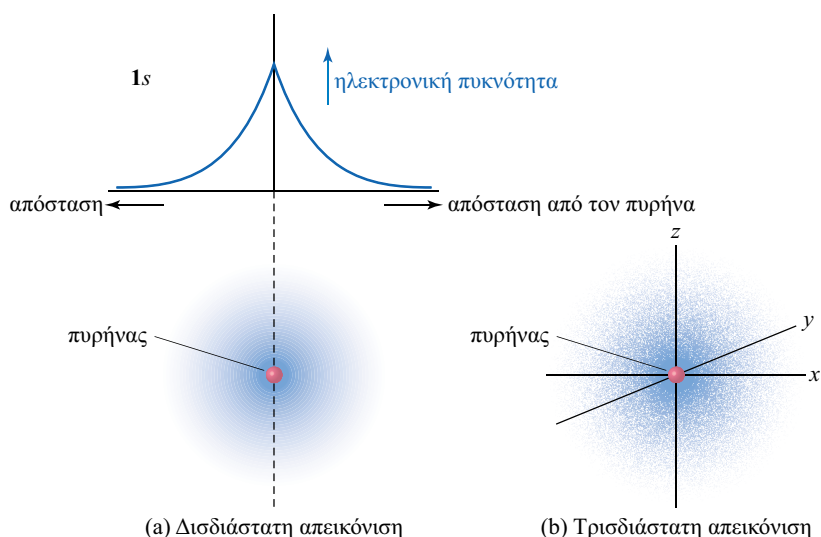
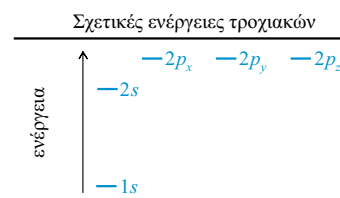
Οι χημικές ιδιότητες ενός στοιχείου καθορίζονται από τον αριθμό των πρωτονίων του πυρήνα και τον αντίστοιχο αριθμό των ηλεκτρονίων που περιβάλλουν τον πυρήνα. Τα ηλεκτρόνια σχηματίζουν δεσμούς και καθορίζουν τη δομή των μορίων που προκύπτουν. Επειδή είναι μικρά σε μέγεθος και ελαφρά, τα ηλεκτρόνια εμφανίζουν ιδιότητες τόσο σωματιδίων όσο και κυμάτων. Με πολλούς τρόπους, τα ηλεκτρόνια στα άτομα και τα μόρια συμπεριφέρονται περισσότερο ως κύματα και λιγότερο ως σωματίδια.

Τα ηλεκτρόνια του πυρήνα εντοπίζονται σε **τροχιακά**. Σύμφωνα με την *αρχή απροσδιοριστίας του Heisenberg* δεν μπορούμε ποτέ να γνωρίζουμε με ακρίβεια τη θέση ενός ηλεκτρονίου, ωστόσο μπορούμε να προσδιορίσουμε την **ηλεκτρονική πυκνότητα**, την πιθανότητα εύρεσης τους ηλεκτρονίου σε ένα συγκεκριμένο μέρος του τροχιακού. Το τροχιακό, αποτελεί επομένως μία επιτρεπτή ενεργειακή κατάσταση για ένα ηλεκτρόνιο, με ορισμένη συνάρτηση πιθανότητας, η οποία και καθορίζει την κατανομή της ηλεκτρονικής πυκνότητας στον χώρο.

Τα ατομικά τροχιακά ομαδοποιούνται σε διαφορετικές «στιβάδες» με διαφορετικές αποστάσεις από τον πυρήνα. Κάθε στιβάδα προσδιορίζεται από τον κύριο κβαντικό αριθμό n , με $n = 1$ για την πλησιέστερη προς τον πυρήνα στιβάδα η οποία έχει και τη μικρότερη ενέργεια. Καθώς το n αυξάνει, οι στιβάδες απομακρύνονται από τον πυρήνα, έχουν μεγαλύτερη ενέργεια και μπορούν να φέρουν περισσότερα ηλεκτρόνια. Τα περισσότερα κοινά στοιχεία των οργανικών ενώσεων συναντώνται στις δύο πρώτες σειρές του περιοδικού πίνακα, υποδεικνύοντας ότι τα ηλεκτρόνά τους βρίσκονται στις δύο πρώτες ηλεκτρονικές στιβάδες. Η πρώτη στιβάδα ($n = 1$) μπορεί να περιέχει μέχρι 2 ηλεκτρόνια και η δεύτερη στιβάδα ($n = 2$) μπορεί να περιέχει μέχρι 8 ηλεκτρόνια.

Η πρώτη ηλεκτρονική στιβάδα περιέχει μόνο το 1s τροχιακό. Όλα τα s τροχιακά εμφανίζουν σφαιρική συμμετρία, που σημαίνει ότι είναι μη κατευθυντήρια. Η ηλεκτρονική πυκνότητα είναι συνάρτηση μόνο της απόστασης από τον πυρήνα. Η ηλεκτρονική πυκνότητα του 1s τροχιακού απεικονίζεται στο Σχήμα 1-3. Παρατηρείστε ότι η ηλεκτρονική πυκνότητα είναι μεγαλύτερη στον πυρήνα και ελαττώνεται εκθετικά, όσο η απόσταση από αυτόν αυξάνει. Μπορούμε να φανταστούμε το 1s τροχιακό σαν μία κάψα βαμβακιού, με τον σπόρο του βαμβακιού στο μέσον να αντιστοιχεί στον πυρήνα. Η πυκνότητα του βαμβακιού είναι μέγιστη κοντά στον σπόρο και ελαττώνεται όσο η απόσταση από τον «πυρήνα» αυξάνεται.

Η δεύτερη ηλεκτρονική στιβάδα αποτελείται από 2s και 2p τροχιακά. Το τροχιακό 2s είναι σφαιρικά συμμετρικό όπως και το 1s τροχιακό, αλλά η ηλεκτρονική του πυκνότητα δεν αποτελεί μία απλή εκθετική συνάρτηση. Το τροχιακό 2s φέρει μικρότερη ποσότητα ηλεκτρονικής πυκνότητας κοντά στον πυρήνα. Το μεγαλύτερο ποσοστό ηλεκτρονικής πυκνότητας βρίσκεται σε μεγαλύτερη απόσταση, πέρα από μία περιοχή μηδενικής ηλεκτρονικής πυκνότητας, γνωστής ως **κόμβος**. Επειδή το μεγαλύτερο ποσοστό της 2s ηλεκτρονικής πυκνότητας βρίσκεται σε μεγαλύτερη απόσταση

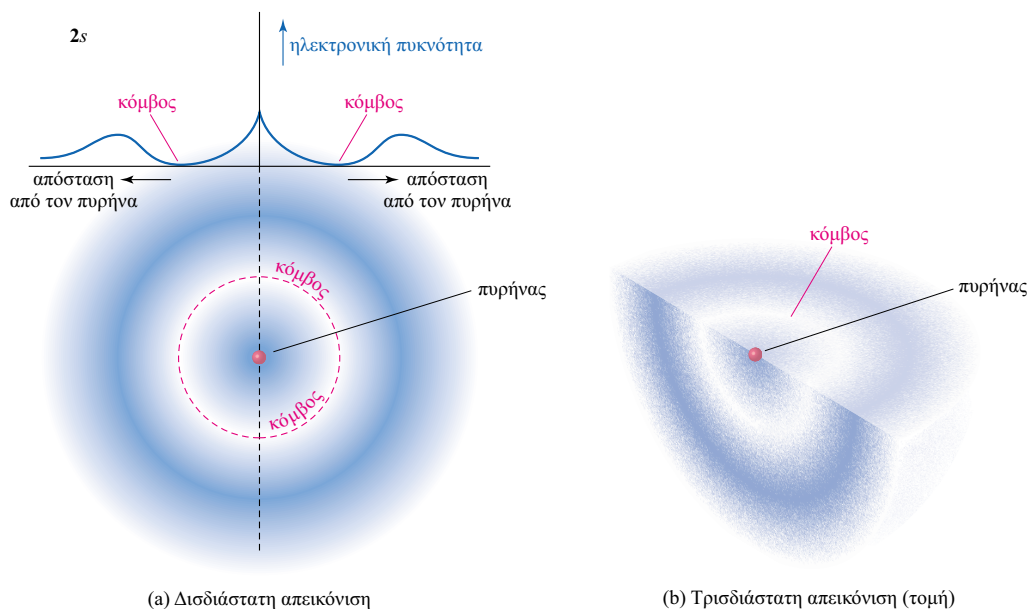


ΣΧΗΜΑ 1-3

Σχηματική παρουσίαση και διάγραμμα του 1s ατομικού τροχιακού. Η ηλεκτρονική πυκνότητα είναι μεγαλύτερη στον πυρήνα και ελαττώνεται εκθετικά με αύξηση της απόστασης από τον πυρήνα, προς οποιαδήποτε κατεύθυνση.

ΣΧΗΜΑ 1-4

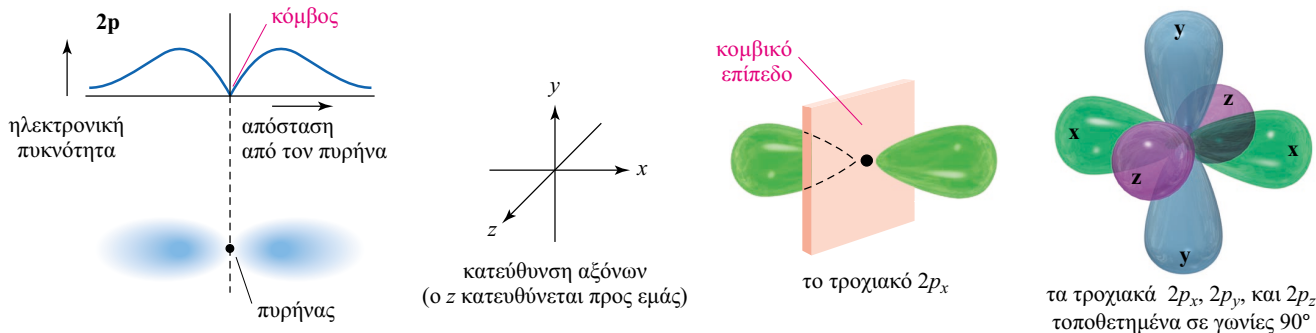
Σχηματική παρουσίαση και διάγραμμα του $2s$ ατομικού τροχιακού. Στο $2s$ ατομικό τροχιακό υπάρχει μία μικρή περιοχή αυξημένης ηλεκτρονικής πυκνότητας κοντά στον πυρήνα, μεγαλύτερη όμως ηλεκτρονική πυκνότητα εντοπίζεται μακρύτερα από τον πυρήνα, πέρα από τον κόμβο δηλαδή την περιοχή μηδενικής ηλεκτρονικής πυκνότητας.



από τον πυρήνα συγκριτικά με την $1s$, το τροχιακό $2s$ έχει υψηλότερη ενέργεια. Στο Σχήμα 1-4 απεικονίζεται σχηματικά το $2s$ τροχιακό.

Εκτός από το $2s$ τροχιακό, η δεύτερη στιβάδα περιέχει επίσης τα $2p$ ατομικά τροχιακά, το καθένα προσανατολισμένο σε μία από τις τρεις κατευθύνσεις του χώρου. Τα τροχιακά αυτά ονομάζονται $2p_x$, $2p_y$ και $2p_z$ ανάλογα με τον προσανατολισμό στους άξονες x , y και z . Η ενέργεια των τροχιακών $2p$ είναι ελαφρά μεγαλύτερη από ό,τι των $2s$, αφού τα ηλεκτρόνια σε ένα $2p$ τροχιακό συνήθως εντοπίζονται σε μεγαλύτερη απόσταση από τον πυρήνα. Κάθε $2p$ τροχιακό αποτελείται από δύο λοβούς, έναν σε κάθε πλευρά του πυρήνα, με ένα **κομβικό επίπεδο** στον πυρήνα. Το κομβικό επίπεδο είναι μία ομαλή περιοχή του χώρου με μηδενική ηλεκτρονική πυκνότητα και περιλαμβάνει τον πυρήνα. Τα τρία $2p$ τροχιακά διαφέρουν μόνο στον προσανατολισμό τους στον χώρο, με αποτέλεσμα να είναι ισοενεργειακά. Τροχιακά με την ίδια ενέργεια ονομάζονται **εκφυλισμένα τροχιακά**. Στο Σχήμα 1-5 απεικονίζονται τα τρία εκφυλισμένα $2p$ ατομικά τροχιακά.

Σύμφωνα με την **απαγορευτική αρχή του Pauli** κάθε τροχιακό δεν μπορεί να περιέχει περισσότερα από δύο ηλεκτρόνια, αρκεί τα spin τους να είναι συζευγμένα. Η δεύτερη στιβάδα (ένα $2s$ τροχιακό και τρία $2p$ τροχιακά) μπορεί να φιλοξενήσει οκτώ ηλεκτρόνια και η τρίτη στιβάδα (ένα $3s$ τροχιακό, τρία $3p$ τροχιακά και πέντε $3d$ τροχιακά) μπορεί να φιλοξενήσει 18 ηλεκτρόνια.

**ΣΧΗΜΑ 1-5**

Τα $2p$ τροχιακά. Τρία $2p$ τροχιακά προσανατολίζονται κάθετα μεταξύ τους. Κάθε ένα από αυτά χαρακτηρίζεται ανάλογα με τον προσανατολισμό του στον άξονα x , y , ή z .

1-2Γ Ηλεκτρονική Δόμηση των Ατόμων

Aufbau στα Γερμανικά σημαίνει «δημιουργώ» και η αρχή *aufbau* μας καθοδηγεί στη διαμόρφωση της ηλεκτρονικής δόμησης της βασικής (σταθερότερης) κατάστασης των ατόμων. Ξεκινώντας με το χαμηλότερης ενέργειας τροχιακό, συμπληρώνουμε τα τροχιακά μέχρι τον επιτρεπόμενο αριθμό ηλεκτρονίων. Στον Πίνακα 1-1 φαίνεται κατανομή των ηλεκτρονίων των βασικών καταστάσεων των στοιχείων των δύο πρώτων σειρών του περιοδικού πίνακα.

Εφαρμογή: Φάρμακα

Το ανθρακικό λίθιο, σταθεροποιητής της διάθεσης, χρησιμοποιείται για την αντιμετώπιση της ψυχιατρικής διαταραχής που είναι γνωστή ως μανία. Η μανία χαρακτηρίζεται από διάθεση ενθουσιασμού, αισθήματα υπεροχής, φευγαλέες σκέψεις και έλλειψη ύπνου. Δεν γνωρίζουμε με ποιο τρόπο το ανθρακικό λίθιο βοηθά στη σταθεροποίηση αυτών των συμπεριφορών του ασθενούς.

Στον Πίνακα 1-1 αναφέρονται δύο ακόμα έννοιες. Τα **ηλεκτρόνια σθένους** είναι τα ηλεκτρόνια της εξώτατης στιβάδας. Ο άνθρακας έχει τέσσερα ηλεκτρόνια σθένους, το άζωτο πέντε και το οξυγόνο έξι. Το ήλιο με συμπληρωμένη την πρώτη στιβάδα και το νέο με συμπληρωμένη τη δεύτερη, έχουν δύο και οκτώ ηλεκτρόνια σθένους, αντίστοιχα. Γενικά (για τα αντιπροσωπευτικά

Τμήμα του περιοδικού πίνακα

1A						ευγενή αέρια 8A
H	2A					He
Li	Be	3A	4A	5A	6A	7A
Na	Mg	B	C	N	O	F
		Al	Si	P	S	Cl
						Ar

ΣΧΗΜΑ 1-6

Οι τρεις πρώτες σειρές του περιοδικού πίνακα. Η οργάνωση του περιοδικού πίνακα είναι αποτέλεσμα της συμπλήρωσης των ατομικών τροχιακών κατά σειρά αυξανόμενης ενέργειας. Για τα αντιπροσωπευτικά αυτά στοιχεία, ο αριθμός της στήλης αντιστοιχεί στον αριθμό των ηλεκτρονίων σθένους.

στοιχεία), ο αριθμός της ομάδας ή της στήλης του περιοδικού πίνακα αντιστοιχεί στον αριθμό των ηλεκτρονίων σθένους (Σχήμα 1-5). Το υδρογόνο και το λίθιο, στοιχεία της πρώτης στήλης (ομάδα 1A) του περιοδικού πίνακα, έχουν ένα ηλεκτρόνιο σθένους. Ο άνθρακας, στοιχείο της ομάδας 4A) του περιοδικού πίνακα, έχει τέσσερα ηλεκτρόνια σθένους.

Παρατηρείστε στον Πίνακα 1-1 ότι το τρίτο και το τέταρτο ηλεκτρόνιο σθένους του άνθρακα δεν είναι συζευγμένα και καταλαμβάνουν διαφορετικά τροχιακά. Αν και σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli δύο ηλεκτρόνια μπορούν να καταλαμβάνουν το ίδιο τροχιακό, τα ηλεκτρόνια απωθούνται μεταξύ τους οπότε η σύζευξη απαιτεί πρόσθετη ενέργεια. Σύμφωνα με τον **κανόνα του Hund**, όταν υπάρχουν δύο ή περισσότερα τροχιακά της ίδιας ενέργειας, τα ηλεκτρόνια θα καταλάβουν διαφορετικά τροχιακά αντί να συζευχθούν στο ίδιο τροχιακό. Το πρώτο 2p ηλεκτρόνιο (βόριο) πάει στο 2p τροχιακό, το δεύτερο (άνθρακας) πάει σε διαφορετικό τροχιακό και το τρίτο (άζωτο) καταλαμβάνει το τελευταίο 2p τροχιακό. Το τέταρτο, πέμπτο και έκτο ηλεκτρόνιο θα πρέπει να συζευχθούν με τα πρώτα τρία ηλεκτρόνια.

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-1

(α) Το άζωτο διαθέτει σχετικά σταθερά ισότοπα (χρόνος ημιζωής μεγαλύτερος από 1 δευτερόλεπτο) με μαζικούς αριθμούς 13, 14, 15, 16 και 17. (Όλα, εκτός από το ^{14}N και ^{15}N είναι ραδιενεργά). Υπολογίστε πόσα πρωτόνια και πόσα νετρόνια υπάρχουν σε κάθε ισότοπο του αζώτου.

(β) Γράψτε τις ηλεκτρονικές διαμορφώσεις των στοιχείων της τρίτης σειράς, όπως απεικονίζονται στο τμήμα του περιοδικού πίνακα του Σχήματος 1-5.

1-3 Σχηματισμός Δεσμών: Ο Κανόνας της Οκτάδας

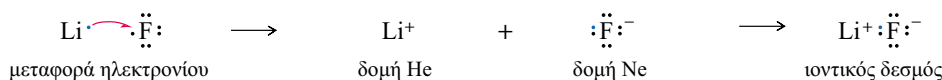
Στα 1915 ο G. N. Lewis πρότεινε αρκετές νέες θεωρίες για να περιγράψει τον τρόπο δημιουργίας δεσμού μεταξύ των ατόμων, με στόχο τον σχηματισμό μορίων. Σύμφωνα με μία από αυτές, μία συμπληρωμένη στιβάδα ηλεκτρονίων είναι ιδιαίτερα σταθερή και τα άτομα μεταφέρουν ή συνεισφέρουν ηλεκτρόνια με τρόπο ώστε να αποκτήσουν συμπληρωμένη ηλεκτρονική στιβάδα. Η συμπληρωμένη στιβάδα ηλεκτρονίων αντιστοιχεί απλά στην ηλεκτρονική διαμόρφωση των ευγενών αερίων όπως το He, Ne, ή το Ar. Η αρχή αυτή ονομάστηκε **κανόνας της οκτάδας**, αφού η συμπληρωμένη στιβάδα υποδηλώνει οκτώ ηλεκτρόνια για τα στοιχεία της δεύτερης σειράς του περιοδικού πίνακα.

Επίλυση προβλήματος - Υπόδειξη

Όταν αναφέρουμε ότι ένα μόριο έχει «όλες τις οκτάδες συμπληρωμένες», εννοούμε ότι τα στοιχεία της δεύτερης σειράς έχουν οκτάδες. Τα άτομα του Υδρογόνου έχουν δύο ηλεκτρόνια (τη διαμόρφωση του He) στη στιβάδα σθένους τους.

1-3A Ιοντικός Δεσμός

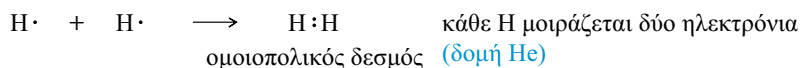
Υπάρχουν δύο τρόποι με τους οποίους τα άτομα μπορούν να αλληλεπιδράσουν και να αποκτήσουν τη διαμόρφωση ευγενούς αερίου. Μερικές φορές αυτό επιτυγχάνεται με την μεταφορά ηλεκτρονίων από το ένα άτομο στο άλλο. Για παράδειγμα το λίθιο διαθέτει ένα ηλεκτρόνιο περισσότερο από το ήλιο, ενώ το φθόριο διαθέτει ένα ηλεκτρόνιο λιγότερο από το νέο. Το λίθιο εύκολα χάνει το ηλεκτρόνιο σθένους του ενώ το φθόριο εύκολα κερδίζει ένα ηλεκτρόνιο:



Η μεταφορά ενός ηλεκτρονίου προσδίδει σε κάθε ένα από τα δύο στοιχεία διαμόρφωση ευγενούς αερίου. Τα ιόντα που προκύπτουν φέρουν αντίθετα φορτία και έλκονται σχηματίζοντας έναν **ιοντικό δεσμό**. Προκύπτει έτσι ένα μεγάλο κρυσταλλικό πλέγμα αντί για μεμονωμένα μόρια. Ο ιοντικός δεσμός απαντάται συχνά σε ανόργανες ενώσεις αλλά σχετικά σπάνια σε οργανικές ενώσεις.

1-3B Ομοιοπολικός Δεσμός

Ο **ομοιοπολικός δεσμός** στον οποίο τα ηλεκτρόνια μοιράζονται και δεν μεταφέρονται, αποτελεί το συνηθέστερο είδος δεσμού στις οργανικές ενώσεις. Το υδρογόνο για παράδειγμα, χρειάζεται ένα δεύτερο ηλεκτρόνιο, ώστε να αποκτήσει τη διαμόρφωση του ευγενούς αερίου, ηλίου. Αν δύο άτομα υδρογόνου ενωθούν και σχηματίσουν δεσμό, θα «μοιραστούν» τα δύο ηλεκτρόνια τους και κάθε άτομο θα διαθέτει δύο ηλεκτρόνια στη στιβάδα σθένους του.

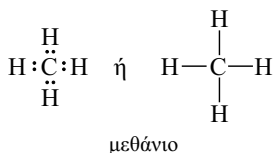


Θα μελετήσουμε διεξοδικότερα τον ομοιοπολικό δεσμό στο παρόν κεφάλαιο.

1-4 Δομές Lewis

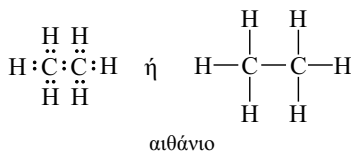
Η χρήση των **δομών Lewis**, αποτελεί έναν τρόπο συμβολισμού του δεσμού σε ένα ομοιοπολικό μόριο. Σε μία δομή Lewis, κάθε ηλεκτρόνιο σθένους συμβολίζεται με μία τελεία. Ένα δεσμικό ζεύγος ηλεκτρονίων συμβολίζεται με δύο τελείες ή με μία παύλα (-). Προσπαθούμε να διευθετήσουμε τα άτομα, έτσι ώστε να αποκτήσουν την κατάλληλη δομή ευγενούς αερίου: δύο ηλεκτρόνια για το υδρογόνο και οκτάδες για τα στοιχεία της δεύτερης στήλης.

Έστω οι δομές Lewis του μεθανίου (CH_4)



Ο άνθρακας συνεισφέρει τέσσερα ηλεκτρόνια σθένους και κάθε υδρογόνο από ένα, όποτε προκύπτουν συνολικά οκτώ ηλεκτρόνια. Και τα οκτώ ηλεκτρόνια περιβάλλουν τον άνθρακα σχηματίζοντας οκτάδα, ενώ κάθε άτομο υδρογόνου μοιράζεται δύο από τα ηλεκτρόνια.

Η δομή Lewis για το αιθάνιο είναι πιο πολύπλοκη.



Και πάλι, υπολογίσαμε τον συνολικό αριθμό ηλεκτρονίων σθένους (14) και τα μοιράσαμε έτσι, ώστε κάθε άτομο άνθρακα να περιβάλλεται από 8 και κάθε υδρογόνο από 2 ηλεκτρόνια. Η μόνη πιθανή δομή για το αιθάνιο είναι η παραπάνω, με τα δύο άτομα άνθρακα να μοιράζονται ένα ζεύγος ηλεκτρονίων και κάθε άτομο υδρογόνου να μοιράζεται ένα ζεύγος με τον έναν από τους δύο άνθρακες. Η δομή του αιθανίου φανερώνει το σημαντικότερο χαρακτηριστικό του άνθρακα, την ικανότητά του να σχηματίζει ισχυρούς δεσμούς άνθρακα-άνθρακα.

Μη δεσμικά ηλεκτρόνια είναι τα ηλεκτρόνια της στιβάδας σθένους, τα οποία δεν μοιράζονται μεταξύ των δύο ατόμων. Ένα ζεύγος μονήρων ηλεκτρονίων ονομάζεται συχνά **μονήρες ζεύγος**. Τα άτομα οξυγόνου, τα άτομα των αλογόνων και τα αλογόνα (F, Cl, Br, I), διαθέτουν συνήθως μη δεσμικά ηλεκτρόνια στις σταθερές ενώσεις τους. Τα μονήρη αυτά ζεύγη μη δεσμικών ηλεκτρονίων βοηθούν στον καθορισμό της δραστηριότητας των μητρικών ενώσεων. Οι παρακάτω δομές Lewis εμφανίζουν ένα μονήρες ζεύγος ηλεκτρονίων στο άτομο αζώτου της μεθυλαμίνης και δύο μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων στο άτομο οξυγόνο της αιθανόλης. Τα άτομα των αλογόνων φέρουν συνήθως τρία μονήρη ηλεκτρόνια, όπως φαίνεται στη δομή του χλωρομεθανίου.

Μία σωστή δομή Lewis θα πρέπει να δείχνει τα μονήρη ζεύγη. Οι οργανικοί χημικοί συχνά σχεδιάζουν δομές, στις οποίες παραλείπουν τα περισσότερα ή όλα τα μονήρη ζεύγη. Αυτές δεν είναι πραγματικές δομές Lewis, αφού θα πρέπει κάποιος να φανταστεί τον σωστό αριθμό των μη δεσμικών ηλεκτρονίων.

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-2: Γράψτε δομές Lewis για τις παρακάτω ενώσεις

- | | |
|---|--|
| (a) αμμωνία, NH_3 | (b) νερό, H_2O |
| (c) ιόν υδρονίου, H_3O^+ | (d) προπάνιο, C_3H_8 |
| (e) διμεθυλαμίνη, CH_3NHCH_3 | (f) διαιθυλαιθέρα, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ |
| (g) 1-χλωροπροπάνιο, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$ | (h) 2-προπανόλη, $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$ |
| (i) βοράνιο, BH_3 | (j) τριφθορίδιο του βορίου, BF_3 |

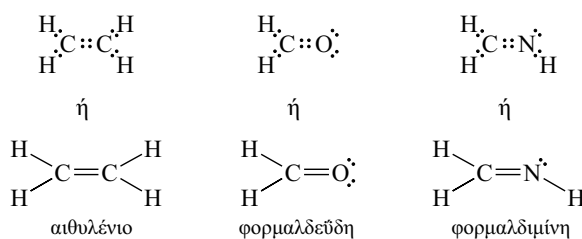
Επίλυση προβλήματος - Υπόδειξη

Οι δομές Lewis είναι ο τρόπος γραφής της οργανικής χημείας. Το να μάθετε να τις γράφετε γρήγορα και σωστά, θα σας βοηθήσει σε όλη τη διάρκεια της μελέτης του μαθήματος αυτού.

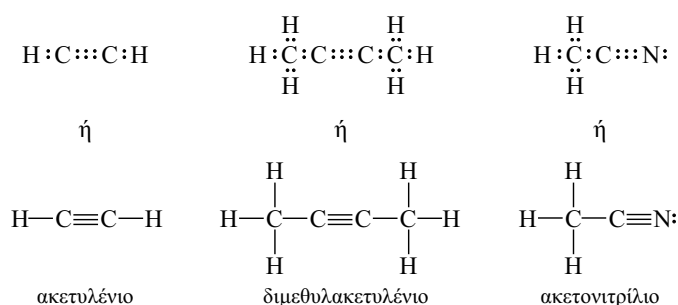
1-5 Πολλαπλοί Δεσμοί

Κατά τον σχεδιασμό των δομών Lewis στην Παράγραφο 1-3, τοποθετήσαμε μόνο ένα ζεύγος ηλεκτρονίων μεταξύ δύο οποιωνδήποτε ατόμων. Το μοίρασμα ενός ζεύγους μεταξύ δύο ατόμων, ονομάζεται **απλός δεσμός**. Σε πολλά μόρια, δύο ή ακόμα και τρία ζεύγη ηλεκτρονίων, μοιράζονται μεταξύ γειτονικών ατόμων. Το μοίρασμα δύο ζευγών ηλεκτρονίων ονομάζεται **διπλός δεσμός** ενώ το μοίρασμα τριών ζευγών ονομάζεται **τριπλός δεσμός**.

Το αιθυλένιο (C_2H_4) είναι μία οργανική ένωση με έναν διπλό δεσμό. Όταν γράφουμε τη δομή Lewis του αιθυλενίου, ο μόνος τρόπος για να εμφανίσουμε και τα δύο άτομα άνθρακα με οκτάδες είναι αυτά να μοιράζονται δύο ζεύγη ηλεκτρονίων. Τα παρακάτω παραδείγματα δείχνουν οργανικές ενώσεις με διπλούς δεσμούς. Σε κάθε περίπτωση, δύο άτομα μοιράζονται τέσσερα ηλεκτρόνια (δύο ζεύγη), ώστε να αποκτήσουν οκτάδες.



Η διπλή παύλα (=) συμβολίζει τον διπλό δεσμό. Το ακετυλένιο (C_2H_2) περιέχει έναν τριπλό δεσμό. Η δομή Lewis εμφανίζει τρία ζεύγη ηλεκτρονίων μεταξύ των ατόμων άνθρακα, ώστε να σχηματιστούν οκτάδες. Το παρακάτω παράδειγμα δείχνει οργανικές ενώσεις με τριπλούς δεσμούς. Η τριπλή παύλα ($\equiv$) συμβολίζει τον τριπλό δεσμό.



Εφαρμογή: Προς πληροφόρησή σας

Το ακετυλένιο είναι ένας υψηλής ενέργειας αέριος υδρογονάνθρακας, εκρηκτικός σε υψηλές πιέσεις. Σε συνδυασμό με οξυγόνο το ακετυλένιο καίγεται με φλόγα τόσο έντονη που μπορεί να λιώσει το ασφάλι. Το ακετυλένιο χρησιμοποιείται συνήθως στις συγκολλήσεις και σε λέβητες κοπής που δουλεύουν παντού, ακόμη και κάτω από το νερό. Σε κυλίνδρους αερίου, το ακετυλένιο διαλύεται σε ακετόνη, ώστε να αποφευχθεί η αύξηση της συγκέντρωσής του και η έκρηξη.

Σύμφωνα με αυτές τις δομές Lewis, σε ουδέτερες οργανικές ενώσεις, ο άνθρακας σχηματίζει κανονικά τέσσερις δεσμούς. Το άζωτο σχηματίζει γενικά τρεις δεσμούς, ενώ το οξυγόνο συνήθως σχηματίζει δύο. Το υδρογόνο και τα αλογόνα σχηματίζουν συνήθως μόνο έναν δεσμό. Ο αριθμός των δεσμών, τους οποίους συνήθως σχηματίζει ένα άτομο, καλείται **σθένος** του ατόμου. Ο άνθρακας είναι τετρασθενής, το άζωτο είναι τρισθενές, το οξυγόνο δισθενές και το υδρογόνο και τα αλογόνα μονοσθενή. Έχοντας υπόψη, τον συνήθη αριθμό δεσμών των κοινών αυτών στοιχείων, μπορούμε εύκολα να γράφουμε οργανικές δομές. Αν σχεδιάσουμε κάθε άτομο με το συνηθισμένο αριθμό δεσμών του, προκύπτει η σωστή δομή Lewis.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ	Κοινοί Τύποι Δεσμών				
	$\begin{array}{c} \\ -\text{C}- \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ -\text{N}- \\ \end{array}$	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ -\text{O}- \\ \cdot\cdot \end{array}$	$-\text{H}$	$\begin{array}{c} \cdot\cdot \\ -\text{Cl}: \\ \cdot\cdot \end{array}$
	άνθρακας	άζωτο	οξυγόνο	υδρογόνο	αλογόνα
σθένος:	4	3	2	1	1
μονήρη ζεύγη:	0	1	2	0	3

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-3: Γράψτε δομές Lewis για τους παρακάτω μοριακούς τύπους

- | | | |
|--|--|---|
| (a) N_2 | (b) HCN | (c) HONO |
| (d) CO_2 | (e) CH_3CHNH_2 | (f) HCO_2H |
| (g) $\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}$ | (h) HNNH | (i) C_3H_6 (ένας διπλός δεσμός) |
| (j) C_3H_4 (δύο διπλοί δεσμοί) | (k) C_3H_4 (δύο διπλοί δεσμοί) | |

Επίλυση προβλήματος - Υπόδειξη

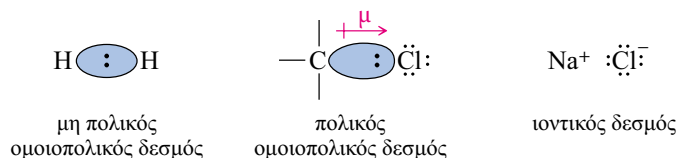
Ο «συνηθισμένος αριθμός δεσμών» μπορεί να είναι απλός δεσμός, ή μπορεί να αναφέρεται σε συνδυασμό διπλών και τριπλών δεσμών. Για παράδειγμα, οι τρεις δεσμοί στο άζωτο μπορεί να είναι τρεις απλοί δεσμοί, ένας απλός και ένας διπλός δεσμός, ή ένας τριπλός δεσμός ($\text{N} \equiv \text{N}$). Κατά την επίλυση προβλημάτων λάβετε υπόψη όλες τις πιθανότητες.

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-4:

Κυκλώστε τα μονήρη ζεύγη (ζεύγη μη δεσμικών ηλεκτρονίων) στις δομές που σχεδιάσατε για το Πρόβλημα 1-3.

1-6 Ηλεκτραρνητικότητα και Πολικότητα Δεσμού

Ο δεσμός στον οποίο τα ηλεκτρόνια ανήκουν εξίσου και στα δύο άτομα καλείται **μη πολικός ομοιοπολικός δεσμός**. Ο δεσμός στο H_2 και το δεσμό $\text{C}-\text{C}$ του αιθανίου είναι μη πολικός ομοιοπολικός δεσμός. Στους περισσότερους δεσμούς μεταξύ δύο διαφορετικών στοιχείων, τα δεσμικά ηλεκτρόνια έλκονται ισχυρότερα από τον ένα από τους δύο πυρήνες. Ζεύγος δεσμικών ηλεκτρονίων το οποίο διαμοιράζεται άνισα, καλείται **πολικός ομοιοπολικός δεσμός**.



$$\mu = \delta \times d$$

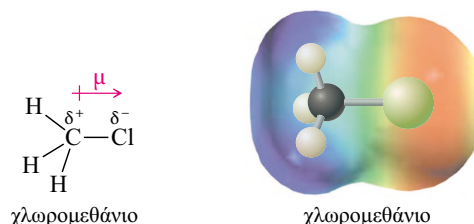
διπολική ροπή

Όταν για παράδειγμα ο άνθρακας ενώνεται με το χλώριο, τα δεσμικά ηλεκτρόνια έλκονται ισχυρότερα από το άτομο του χλωρίου. Το άτομο άνθρακα φέρει ένα μικρό, μερικό θετικό φορτίο, ενώ το άτομο του χλωρίου ένα μερικό αρνητικό φορτίο. Στο Σχήμα 1-7 φαίνεται ο πολικός δεσμός άνθρακα-χλωρίου στο μεθυλοχλωρίδιο. Συμβολίζουμε την πολικότητα δεσμού με ένα βέλος με την κεφαλή του στο αρνητικό άκρο του πολικού δεσμού και το σημείο συν στο θετικό άκρο. Η πολικότητα δεσμού υπολογίζεται από την **διπολική ροπή** του (μ) η οποία ορίζεται ως η ποσότητα του διαχωρισμού φορτίου (δ^+ και δ^-) επί το μήκος του δεσμού. Το σύμβολο δ^+ σημαίνει «μικρή ποσότητα θετικού φορτίου» και δ^- σημαίνει «μικρή ποσότητα αρνητικού φορτίου».

Στο Σχήμα 1-7 έχουμε τον **χάρτη ηλεκτροστατικού δυναμικού (ΕΡΜ)** του χλωρομεθανίου, όπου τα διάφορα χρώματα αντιπροσωπεύουν την υπολογιζόμενη κατανομή φορτίου σε ένα μόριο. Το κόκκινο, αντιπροσωπεύει πλούσιες ηλεκτρονικά περιοχές ενώ το μπλε, φτωχές ηλεκτρονικά περιοχές. Το πορτοκαλί, το κίτρινο και το πράσινο υποδηλώνουν ενδιάμεσα επίπεδα ηλεκτροστατικού δυναμικού. Στο χλωρομεθάνιο, η κόκκινη περιοχή αντιστοιχεί στο μερικό αρνητικό φορτίο του χλωρίου και η μπλε περιοχή στα κλάσματα μερικά θετικά φορτία του άνθρακα και των ατόμων υδρογόνου.

Συχνά, χρησιμοποιούμε τις **ηλεκτραρνητικότητες** ως οδηγό για να προβλέψουμε αν ένας συγκεκριμένος δεσμός θα είναι πολικός καθώς και την κατεύθυνση της διπολικής του ροπής. Η κλίμακα ηλεκτραρνητικότητας του Pauling, ευρέως χρησιμοποιούμενη από τους οργανικούς χημικούς, βασίζεται στις ιδιότητες των δεσμών και είναι χρήσιμη κατά την πρόβλεψη σχηματισμού ομοιοπολικών δεσμών. Στοιχεία με μεγάλες ηλεκτραρνητικότητες έλκουν γενικά ισχυρότερα τα δεσμικά ηλεκτρόνια. Επομένως, σε ένα δεσμό μεταξύ δύο διαφορετικών ατόμων, το άτομο με την μεγαλύτερη ηλεκτραρνητικότητα αποτελεί το αρνητικό άκρο του διπόλου. Στο Σχήμα 1-8 φαίνονται οι ηλεκτραρνητικότητες Pauling για μερικά σημαντικά στοιχεία οργανικών ενώσεων.

Παρατηρήστε ότι οι ηλεκτραρνητικότητες αυξάνουν από αριστερά προς τα δεξιά του περιοδικού πίνακα. Το άζωτο, το οξυγόνο και τα αλογόνα είναι περισσότερο ηλεκτραρνητικά από τον άνθρακα ενώ το νάτριο, το λίθιο και το μαγνήσιο είναι λιγότερο ηλεκτραρνητικά. Η ηλεκτραρνητικότητα του υδρογόνου είναι παραπλήσια με αυτή του άνθρακα και έτσι θεωρούμε συνήθως ότι οι δεσμοί C-H είναι μη πολικοί. Θα εξετάσουμε τις πολικότητες των δεσμών και των μορίων με περισσότερες λεπτομέρειες στην Παράγραφο 2-1.



ΣΧΗΜΑ 1-7

Πολικότητα δεσμού. Το χλωρομεθάνιο περιέχει έναν πολικό δεσμό άνθρακα-χλωρίου με το μερικό αρνητικό φορτίο στο χλώριο και το μερικό θετικό φορτίο στον άνθρακα. Ο χάρτης ηλεκτροστατικού δυναμικού δείχνει μία κόκκινη περιοχή (πλούσια σε ηλεκτρόνια) γύρω από το κλάσμα του αρνητικού φορτίου και μία μπλε περιοχή (φτωχή σε ηλεκτρόνια) γύρω από το κλάσμα του θετικού φορτίου. Τα υπόλοιπα χρώματα υποδηλώνουν ενδιάμεσες τιμές ηλεκτροστατικού δυναμικού.

H 2.2						
Li 1.0	Be 1.6	B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.4	F 4.0
Na 0.9	Mg 1.3	Al 1.6	Si 1.9	P 2.2	S 2.6	Cl 3.2
K 0.8						Br 3.0
						I 2.7

ΣΧΗΜΑ 1-8

Οι ηλεκτραρνητικότητες Pauling μερικών από τα στοιχεία των οργανικών ενώσεων.

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-5

Χρησιμοποιείστε τις ηλεκτραρνητικότητες για να προβλέψετε την κατεύθυνση των διπολικών ροπών στους παρακάτω δεσμούς.

- (a) C—Cl (b) C—O (c) C—N (d) C—S (e) C—B
 (f) N—Cl (g) N—O (h) N—S (i) N—B (j) B—Cl

1-7 Τυπικά Φορτία

Στους πολικούς δεσμούς, τα μερικά φορτία (δ^+ και δ^-) των συνδεδεμένων ατόμων είναι *πραγματικά*. Τα **τυπικά φορτία** παρέχουν μία μέθοδο εντοπισμού ηλεκτρονίων, μπορεί όμως να αντιστοιχούν ή να μην αντιστοιχούν στα πραγματικά φορτία. Στις περισσότερες περιπτώσεις, αν η δομή Lewis υποδεικνύει ότι ένα άτομο φέρει ορισμένο τυπικό φορτίο, στην πραγματικότητα το άτομο φέρει τουλάχιστον ένα μέρος του φορτίου αυτού. Η έννοια του τυπικού φορτίου μας βοηθά να προσδιορίσουμε ποια άτομα φέρουν μεγαλύτερο φορτίο σε ένα φορτισμένο μόριο, αλλά και να εντοπίσουμε τα φορτισμένα άτομα σε μόρια συνολικά ουδέτερα.

Για να υπολογίσετε τα τυπικά φορτία, μετρήστε τα ηλεκτρόνια που συνεισφέρουν στο φορτίο κάθε ατόμου και συγκρίνετε τον αριθμό αυτό με τον αριθμό των ηλεκτρονίων σθένους στο ελεύθερο ουδέτερο άτομο (με βάση τον αριθμό της ομάδας στην οποία ανήκει στον περιοδικό πίνακα). Τα ηλεκτρόνια που συνεισφέρουν στο φορτίο ενός ατόμου είναι:

1. όλα τα ηλεκτρόνια που δεν μοιράζονται (μη δεσμικά), συν

2. τα μισά από τα (δεσμικά) ηλεκτρόνια που μοιράζεται με άλλα άτομα, ή ένα ηλεκτρόνιο από κάθε δεσμικό ζεύγος.

Το τυπικό φορτίο ενός συγκεκριμένου ατόμου μπορεί να υπολογιστεί από τον τύπο

$$\text{τυπικό φορτίο (FC)} = [\text{αριθμός ομάδας}] - [\text{μη δεσμικά ηλεκτρόνια}] - 1/2 [\text{μοιραζόμενα ηλεκτρόνια}]$$

ΛΥΜΕΝΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-1

Υπολογίστε το τυπικό φορτίο (FC) κάθε ατόμου για τις εξής δομές.

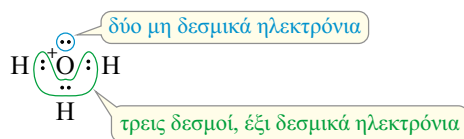
(a) Μεθάνιο (CH_4)

**ΛΥΣΗ**

Κάθε ένα από τα άτομα υδρογόνου στο μεθάνιο διαθέτει ένα δεσμικό ζεύγος ηλεκτρονίων (δύο κοινά ηλεκτρόνια). Το μισό από τα δύο κοινά ηλεκτρόνια είναι ένα ηλεκτρόνιο, ενώ το υδρογόνο χρειάζεται ένα ηλεκτρόνιο σθένους για να γίνει ουδέτερο. Άτομα υδρογόνου με ένα δεσμό είναι τυπικά ουδέτερα: $\text{FC} = 1 - 0 - 1 = 0$

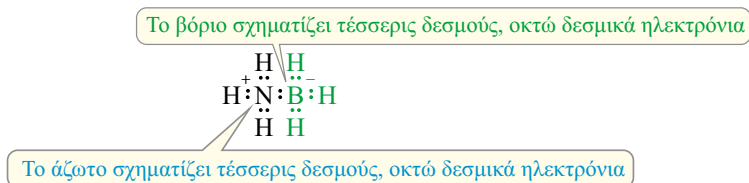
Το άτομο άνθρακα διαθέτει τέσσερα δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων (οκτώ ηλεκτρόνια). Το μισό των οκτώ κοινών ηλεκτρονίων είναι τέσσερα ηλεκτρόνια, ενώ τέσσερα είναι και τα ηλεκτρόνια που χρειάζεται ο άνθρακας (ομάδα 4A) για να γίνει ουδέτερος. Ο άνθρακας είναι τυπικά ουδέτερος, όποτε εμφανίζεται με τέσσερις δεσμούς: $\text{FC} = 4 - 0 - 1/2(8) = 0$

(b) Το ιόν υδρονίου

**ΛΥΣΗ**

Για να σχεδιάσουμε τη δομή Lewis του ιόντος αυτού, χρησιμοποιούμε οκτώ ηλεκτρόνια: έξι από το οξυγόνο συν τρία από τα υδρογόνα, μείον ένα, αφού το ιόν εμφανίζει θετικό φορτίο. Κάθε υδρογόνο σχηματίζει ένα δεσμό και είναι τυπικά ουδέτερο. Το οξυγόνο περιβάλλεται από μία οκτάδα, με έξι δεσμικά και δύο μη δεσμικά ηλεκτρόνια. Το μισό των δεσμικών ηλεκτρονίων συν όλα τα μη δεσμικά ηλεκτρόνια, συνεισφέρουν στο φορτίο του: $6/2 + 2 = 5$. Το οξυγόνο όμως (ομάδα 6A) χρειάζεται έξι ηλεκτρόνια για να γίνει ουδέτερο. Συνεπώς, το άτομο του οξυγόνου έχει τυπικό φορτίο ίσο με +1: $\text{FC} = 6 - 2 - 1/2(6) = +1$

(c) $\text{H}_3\text{N}-\text{BH}_3$

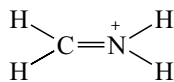
**ΛΥΣΗ**

Πρόκειται για ουδέτερη ένωση με τα μεμονωμένα άτομα τυπικά φορτισμένα. Η δομή Lewis δείχνει ότι τόσο το άζωτο όσο και το βόριο μοιράζονται τέσσερα δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων. Τόσο στο βόριο όσο και στο άζωτο υπάρχουν $8/2 = 4$ ηλεκτρόνια που συνεισφέρουν στα φορτία τους. Το άζωτο (ομάδα 5A) χρειάζεται πέντε ηλεκτρόνια σθένους για να γίνει ουδέτερο, όποτε φέρει τυπικό φορτίο ίσο με +1. Το βόριο (ομάδα 3A) χρειάζεται μόνο τρία ηλεκτρόνια σθένους για να γίνει ουδέτερο, όποτε φέρει τυπικό φορτίο ίσο με -1.

$$\text{Άζωτο: FC} = 5 - 0 - 1/2(8) = +1$$

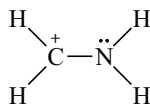
$$\text{Βόριο: FC} = 3 - 0 - 1/2(8) = -1$$

(d) $[\text{H}_2\text{CNH}_2]^+$

**ΛΥΣΗ**

Στη δομή αυτή, τόσο ο άνθρακας όσο και το άζωτο μοιράζονται τέσσερα ζεύγη δεσμικών ηλεκτρονίων. Με τέσσερις δεσμούς, ο άνθρακας είναι τυπικά ουδέτερος, ωστόσο το άζωτο βρίσκεται στην ομάδα 5A και εμφανίζει θετικό τυπικό φορτίο: $\text{FC} = 5 - 0 - 4 = +1$.

Η ένωση αυτή μπορεί, επίσης, να γραφεί με την εξής δομή Lewis:



Στη δομή αυτή, το άτομο άνθρακα σχηματίζει τρεις δεσμούς με έξι ηλεκτρόνια σθένους. Υπολογίζουμε $6/2 = 3$ ηλεκτρόνια, δηλαδή ο άνθρακας διαθέτει ένα ηλεκτρόνιο λιγότερο από τα τέσσερα που απαιτούνται για να γίνει τυπικά ουδέτερος: $\text{FC} = 4 - 0 - 1/2(6) = +1$

Το άζωτο διαθέτει έξι δεσμικά και δύο μη δεσμικά ηλεκτρόνια. Υπολογίζουμε $6/2 + 2 = 5$, όποτε το άζωτο είναι αφόρτιστο σε αυτήν τη δεύτερη δομή:

$$\text{FC} = 5 - 2 - 1/2(6) = 0$$

Η σημασία των δύο αυτών δομών Lewis θα συζητηθεί στην Παράγραφο 1-9.

Επίλυση προβλήματος - Υπόδειξη

Ο συγκεκριμένος, είναι ένας πολύ σημαντικός πίνακας. Εξασκηθείτε με αρκετά προβλήματα, ώστε να εξοικειωθείτε με αυτά τα είδη δεσμών και να είστε σε θέση αναγνωρίζετε ασυνήθιστα ή λανθασμένα είδη δεσμών.

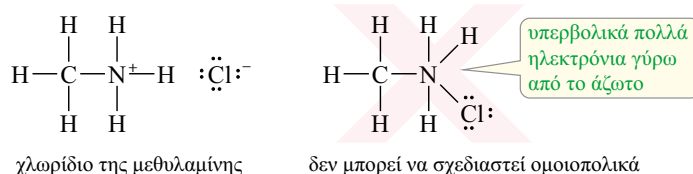
ΠΕΡΙΛΗΠΤΙΚΟΣ ΠΙΝΑΚΑΣ 1-1 Κοινά Είδη Δεσμών σε Οργανικές Ενώσεις και Ιόντα

Άτομο	Ηλεκτρόνια Σθένους	Θετικά Φορτισμένα	Ουδέτερα	Αρνητικά Φορτισμένα
B	3			
C	4			
N	5			
O	6			
αλογόνο	7			

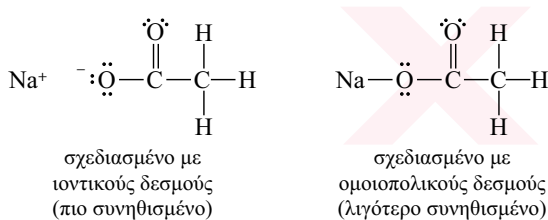
Οι περισσότερες οργανικές ενώσεις περιέχουν συνήθως, μικρό αριθμό κοινών στοιχείων με συμπληρωμένες οκτάδες ηλεκτρονίων. Ο περιληπτικός πίνακας δείχνει τις πιο συνηθισμένες δομές δεσμών, όπου οι παύλες αντιστοιχούν σε δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων. Χρησιμοποιείτε τους κανόνες υπολογισμού των τυπικών φορτίων για να επαληθεύσετε τα φορτία που φαίνονται στις δομές αυτές. Η επαρκής κατανόηση των δομών αυτών θα σας βοηθήσει στο να σχεδιάζετε τις οργανικές ενώσεις και τα ιόντα τους εύκολα και σωστά.

1-8 Ιοντικές Δομές

Μερικές οργανικές ενώσεις περιέχουν ιοντικούς δεσμούς. Για παράδειγμα, η δομή του χλωριούχου μεθυλαμμώνιου ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Cl}$) δεν μπορεί να αποδοθεί χρησιμοποιώντας ομοιοπολικούς δεσμούς. Η ύπαρξη ομοιοπολικών δεσμών θα σήμαινε πέντε δεσμούς στο άζωτο και δέκα ηλεκτρόνια στη στιβάδα σθένους του. Η σωστή δομή δείχνει το ιόν του χλωρίου ιοντικά συνδεδεμένο με την υπόλοιπη δομή.



Μερικά μόρια μπορούν να σχεδιαστούν ομοιοπολικά ή ιοντικά. Για παράδειγμα, το οξικό νάτριο (NaOCH_3) μπορεί να σχεδιαστεί με έναν ομοιοπολικό δεσμό ή με έναν ιοντικό δεσμό μεταξύ του νατρίου και του οξυγόνου. Επειδή το νάτριο γενικά σχηματίζει ιοντικούς δεσμούς με το οξυγόνο (όπως στο NaOH), προτιμάται συνήθως η δομή με τους ιοντικούς δεσμούς. Γενικά, οι δεσμοί μεταξύ ατόμων με πολύ μεγάλες διαφορές ηλεκτραρνητικότητας (περίπου 2 ή περισσότερες) σχεδιάζονται συνήθως ως ιοντικοί.

**ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-6**

Σχεδιάστε τις δομές Lewis για τις παρακάτω ενώσεις και ιόντα, γράφοντας και τα κατάλληλα τυπικά φορτία.

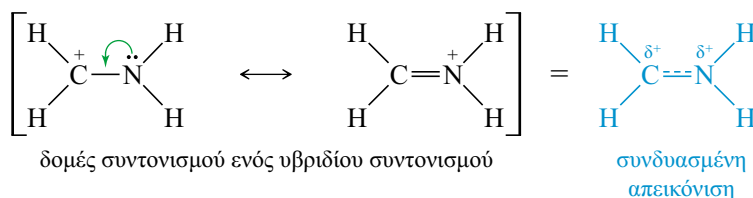
- | | | |
|----------------------------------|---------------------------------|---|
| (a) $[\text{CH}_3\text{OH}_2]^+$ | (b) NH_4Cl | (c) $(\text{CH}_3)_4\text{NCl}$ |
| (d) NaOCH_3 | (e) $^+\text{CH}_3$ | (f) $^-\text{CH}_3$ |
| (g) NaBH_3 | (h) NaBH_3CN | (i) $(\text{CH}_3)_2\text{O}-\text{BF}_3$ |
| (j) $[\text{HONH}_3]^+$ | (k) $\text{KOC}(\text{CH}_3)_3$ | (l) $[\text{H}_2\text{C}=\text{OH}]^+$ |

1-9 Συντονισμός

Οι δομές μερικών ενώσεων δεν αντιπροσωπεύονται επαρκώς από μία μοναδική δομή Lewis. Στην περίπτωση που είναι δυνατές δύο ή περισσότερες δομές Lewis, με μοναδική διαφορά τη διεύθυνση των ηλεκτρονίων, το μόριο εμφανίζει συνήθως χαρακτηριστικά και των δύο δομών. Οι διαφορετικές δομές ονομάζονται **δομές συντονισμού** ή **μορφές συντονισμού**, αφού δεν αποτελούν διαφορετικές ενώσεις, αλλά διαφορετικούς τρόπους γραφής της ίδιας ένωσης. Το πραγματικό μόριο καλείται **υβρίδιο συντονισμού** των δομών συντονισμού του.

1-9A Υβρίδια συντονισμού

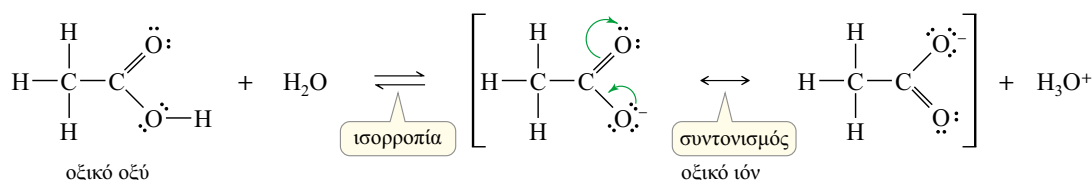
Στο Λυμένο Πρόβλημα 1-1(δ) είδαμε ότι το ιόν $[\text{H}_2\text{CNH}_2]^+$ μπορεί να παρασταθεί με έναν από τους παρακάτω τύπους:



Η πραγματική δομή του ιόντος αυτού, αποτελεί ένα υβρίδιο συντονισμού των δύο δομών. Στο πραγματικό μόριο το θετικό φορτίο **απεντοπίζεται** (διαχέεται) τόσο στο άτομο άνθρακα όσο και στο άτομο του αζώτου. Στην αριστερή μορφή συντονισμού, το θετικό φορτίο βρίσκεται στον άνθρακα, αλλά ο άνθρακας δεν έχει αποκτήσει οκτάδα. Τα μη δεσμικά ηλεκτρόνια του αζώτου μπορούν να κινηθούν στον δεσμό, (όπως δείχνει το κόκκινο βέλος) σχηματίζοντας τη δεύτερη δομή (αυτή με τον διπλό δεσμό άνθρακα-αζώτου), το θετικό φορτίο στο άζωτο και την οκτάδα στον άνθρακα. Η συνδυασμένη απεικόνιση επιχειρεί να συνδυάσει τις δύο μορφές συντονισμού σε μία εικόνα με το φορτίο να μοιράζεται μεταξύ άνθρακα και αζώτου.

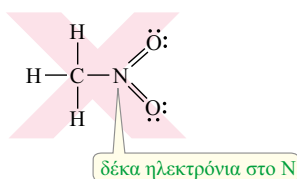
Η κατανομή του θετικού φορτίου μεταξύ των δύο ατόμων καθιστά το ιόν σταθερότερο από όσο θα ήταν, αν ολόκληρο το φορτίο εντοπιζόταν μόνο στον άνθρακα ή μόνο στο άζωτο. Έχουμε εδώ ένα **σταθεροποιημένο λόγω συντονισμού** κατιόν. Ο συντονισμός είναι σημαντικότερος, όταν επιτρέπει σε ένα φορτίο να απεντοπίζεται σε δύο ή περισσότερα άτομα, όπως στο παράδειγμα αυτό.

Η σταθεροποίηση λόγω συντονισμού παίζει κρίσιμο ρόλο στην οργανική χημεία, ειδικά στη χημεία των ενώσεων με διπλούς δεσμούς. Θα χρησιμοποιούμε συχνά την έννοια του συντονισμού σε όλη την έκταση του μαθήματος αυτού. Για παράδειγμα, η οξύτητα του οξικού οξέος (παρακάτω) ενισχύεται εξαιτίας των συνεπειών του συντονισμού. Όταν το οξικό οξύ χάσει ένα πρωτόνιο, το οξικό ιόν που προκύπτει φέρει ένα αρνητικό φορτίο απεντοπισμένο και στα δύο άτομα οξυγόνου. Κάθε άτομο οξυγόνου φέρει το μισό αρνητικό φορτίο και αυτός ο απεντοπισμός σταθεροποιεί το ιόν. Κάθε ένας από τους δεσμούς άνθρακα – οξυγόνου αποτελεί κάτι το ενδιάμεσο μεταξύ απλού και διπλού δεσμού και λέμε ότι έχει τάξη δεσμού ίση με $1\frac{1}{2}$.



Επίλυση προβλήματος - Υπόδειξη

Τα στοιχεία της δεύτερης σειράς (B, C, N, O, F) δεν μπορούν να περιέχουν περισσότερα από οκτώ ηλεκτρόνια στις στιβάδες σθένους τους. Παρακάτω βλέπουμε μία μη έγκυρη δομή Lewis:



Επίλυση προβλήματος - Υπόδειξη

Χρησιμοποιούμε τέσσερις τύπους βελών για τον σχεδιασμό δομών και αντιδράσεων.

→ Βέλη αντίδρασης που δείχνουν τη μετατροπή αντιδρώντων σε προϊόντα.

⇌ Βέλη ισορροπίας που δείχνουν ισόποσες αντιδράσεις και προς τις δύο κατευθύνσεις

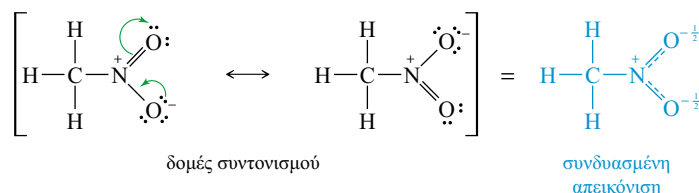
↔ Τα βέλη συντονισμού συνδέουν μορφές που είναι στην πραγματικότητα η ίδια δομή, αλλά σχεδιάζονται με τα απεντοπισμένα ηλεκτρόνια τοποθετημένα διαφορετικά.

↷. Πράσινα καμπυλωτά βέλη, είναι ένα νοητό εργαλείο που χρησιμοποιείται για να αποδώσει τη νοητή μετακίνηση ηλεκτρονίων από τη μια μορφή συντονισμού στην άλλη.

Χρησιμοποιούμε ένα απλό βέλος, διπλής κατεύθυνσης, μεταξύ των δομών συντονισμού (και συχνά τις κλείνουμε σε παρένθεση) για να δείξουμε ότι η πραγματική δομή αποτελεί υβρίδιο των δομών Lewis που γράψαμε. Αντίθετα, η ισορροπία εκφράζεται με δύο βέλη σε αντίθετες κατευθύνσεις. Περιστασιακά χρησιμοποιούμε καμπυλωτά βέλη (κόκκινο χρώμα) για να δείξουμε πώς μετακινούμε νοερά τα ηλεκτρόνια μεταξύ δύο μορφών συντονισμού. Τα ηλεκτρόνια στην πραγματικότητα δεν «συντονίζονται» μπρος-πίσω, αλλά απεντοπίζονται σε όλες τις δομές συντονισμού ταυτόχρονα.

Μερικά αφόρτιστα μόρια, με δομές σταθεροποιημένες λόγω συντονισμού, έχουν στην πραγματικότητα ίσα θετικά και αρνητικά τυπικά φορτία. Για παράδειγμα, μπορούμε να σχεδιάσουμε δύο δομές Lewis για το νιτρομεθάνιο (CH_3NO_2), αλλά και οι δύο φέρουν θετικό φορτίο στο άζωτο και αρνητικό σε ένα από τα οξυγόνα. Έτσι, το νιτρομεθάνιο έχει ένα θετικό φορτίο στο

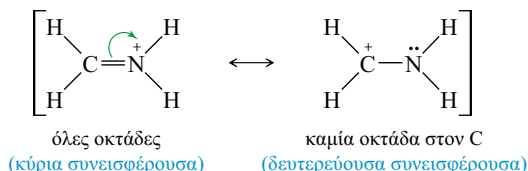
άζωτο και ένα αρνητικό φορτίο, που διαχέεται εξίσου πάνω από τα δύο άτομα οξυγόνου. Οι δεσμοί N-O αποτελούν κάτι το ενδιάμεσο μεταξύ απλού και διπλού δεσμού, όπως φαίνεται στη συνδυασμένη απεικόνιση:



Θυμηθείτε ότι μεμονωμένες δομές συντονισμού δεν υπάρχουν. Το μόριο δεν «συντονίζεται» μεταξύ των δομών αυτών. Αποτελεί ένα υβρίδιο μεταξύ των χαρακτηριστικών και των δύο. Κάτι ανάλογο είναι το μουλάρι, το οποίο είναι ένα υβρίδιο ενός αλόγου και ενός γαϊδουριού. Το μουλάρι δεν «συντονίζεται» μεταξύ της μορφής του αλόγου και της μορφής του γαϊδουριού, έχει διαρκώς τη μορφή του μουλαριού, με τη μεγάλη ράχη του αλόγου και τα μεγάλα αυτιά του γαϊδουριού.

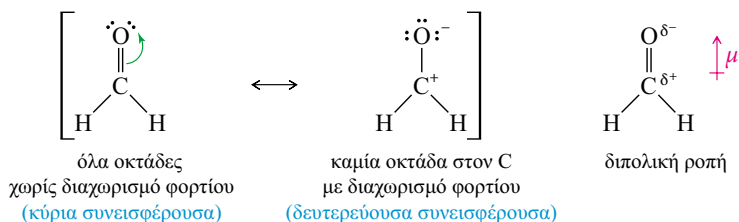
1-9B Κύριες και Δευτερεύουσες Συνεισφέρουσες Συντονισμοί

Δύο ή περισσότερες ορθές δομές Lewis για την ίδια ένωση μπορεί να αντιπροσωπεύουν ή να μην αντιπροσωπεύουν κατανομές ηλεκτρονίων ίσης ενέργειας. Αν και μεμονωμένες δομές συντονισμού δεν υπάρχουν, μπορούμε να εκτιμήσουμε τις σχετικές τους ενέργειες, σαν να υπήρχαν. Οι σταθερότερες δομές συντονισμού αντιπροσωπεύουν καλύτερα το πραγματικό μόριο από ό,τι οι ασταθέστερες. Οι δύο δομές συντονισμού του οξικού ιόντος που παρουσιάστηκαν παραπάνω, φέρουν παρόμοιους δεσμούς και είναι ίσης ενέργειας. Το ίδιο ισχύει και για τις δύο δομές συντονισμού του νιτρομεθανίου. Ωστόσο, οι παρακάτω δομές συντονισμού φέρουν διαφορετικούς δεσμούς.



Η ενέργεια που υπολογίζεται για τις δομές αυτές δεν είναι η ίδια. Η πρώτη δομή φέρει το θετικό φορτίο στο άζωτο. Η δεύτερη, φέρει το θετικό φορτίο στον άνθρακα, ενώ το άτομο άνθρακα δεν συμπληρώνει οκτάδα. Η πρώτη δομή είναι σταθερότερη, αφού έχει έναν επιπλέον δεσμό και όλα τα άτομα συμπληρώνουν οκτάδες. Πολλά σταθερά ιόντα φέρουν θετικό φορτίο σε άτομα αζώτου με τέσσερις δεσμούς (βλέπε Περίληψη Πίνακα 1-1). Ονομάζουμε τη σταθερότερη δομή συντονισμού **κύρια συνεισφέρουσα** και τη λιγότερο σταθερή **δευτερεύουσα συνεισφέρουσα**. Η δομή της πραγματικής ένωσης μοιάζει περισσότερο με την κύρια συνεισφέρουσα συγκριτικά με την δευτερεύουσα.

Πολλά οργανικά μόρια εμφανίζουν κύριες και δευτερεύουσες συνεισφέρουσες. Η φορμαλδεΐδη ($\text{H}_2\text{C}=\text{O}$) μπορεί να γραφεί με ένα αρνητικό φορτίο στο οξυγόνο σε ισορροπία με ένα θετικό στον άνθρακα. Η πολική αυτή δομή συντονισμού υπολογίζεται ότι έχει υψηλότερη ενέργεια από ότι η δομή με το διπλό δεσμό επειδή εμφανίζει διαχωρισμό φορτίου, λιγότερους δεσμούς και ένα θετικά φορτισμένο άτομο άνθρακα με συμπληρωμένη οκτάδα. Η δομή που εμφανίζει διαχωρισμό φορτίου είναι απλώς μία δευτερεύουσα συνεισφέρουσα, μας βοηθά όμως στο να κατανοήσουμε τον λόγο για τον οποίο ο δεσμός $\text{C}=\text{O}$ της φορμαλδεΐδης είναι έντονα πολικός, με μερικό φορτίο στον άνθρακα και μερικό αρνητικό φορτίο στο οξυγόνο. Στον χάρτη ηλεκτροστατικού δυναμικού (EPM) της φορμαλδεΐδης φαίνεται η ηλεκτρονικά πλούσια περιοχή (κόκκινη) γύρω από το οξυγόνο και η ηλεκτρονικά φτωχή περιοχή (μπλε) γύρω από τον άνθρακα.

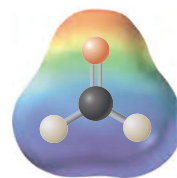


Κατά τη γραφή δομών συντονισμού, προσπαθούμε να σχεδιάσουμε δομές με όσο το δυνατό χαμηλότερη ενέργεια. Καλύτερες υποψήφιες είναι αυτές με τον μέγιστο αριθμό οκτάδων και τον μέγιστο αριθμό δεσμών. Επίσης, αναζητούμε δομές με το μικρότερο διαχωρισμό φορτίου.

Μόνο τα ηλεκτρόνια μπορούν να απεντοπιστούν. Αντίθετα από τα ηλεκτρόνια, οι πυρήνες δεν μπορούν να απεντοπιστούν. Πρέπει να παραμένουν στις ίδιες θέσεις, με τις ίδιες δεσμικές αποστάσεις και γωνίες σε όλες τις συνεισφέρουσες συντονισμούς.

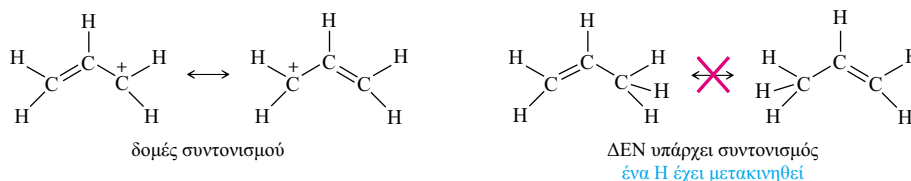
Οι παρακάτω γενικοί κανόνες θα σας βοηθήσουν στον σχεδιασμό ρεαλιστικών δομών συντονισμού:

1. Όλες οι δομές συντονισμού πρέπει να αποτελούν έγκυρες δομές Lewis της ένωσης.
2. Μόνο η τοποθέτηση των ηλεκτρονίων μπορεί να μετατοπιστεί από τη μια δομή στην άλλη. (Τα ηλεκτρόνια των διπλών δεσμών και των μονήρων ζευγών είναι αυτά που συνήθως μετακινούνται).



EPM της φορμαλδεΐδης

3. Οι πυρήνες δεν μπορούν να μετατοπιστούν ενώ οι γωνίες δεσμών πρέπει να παραμένουν ίδιες.
4. Οι σίγμα δεσμοί είναι πολύ σταθεροί και σπάνια συμμετέχουν στο συντονισμό.
5. Η κύρια συνεισφέρουσα δομή συντονισμού είναι αυτή με την χαμηλότερη ενέργεια. Οι καλές συνεισφέρουσες δομές έχουν συμπληρωμένες όλες τις οκτάδες, όσο το δυνατόν λιγότερο διπλούς δεσμούς και όσο το δυνατόν μικρότερο διαχωρισμό φορτίου.
6. Τα ηλεκτραρνητικά άτομα όπως N, O και αλογόνα βοηθούν να απεντοπίζονται τα θετικά φορτία, αλλά μπορούν να φέρουν θετικό φορτίο αν έχουν οκτάδες.
7. Η σταθεροποίηση μέσω συντονισμού είναι πιο σημαντική όταν συνεισφέρει στον απεντοπισμό ενός φορτίου σε δύο ή περισσότερα άτομα.



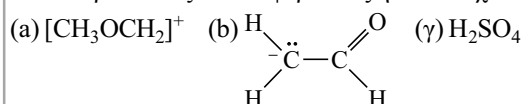
Επίλυση προβλήματος - Υπόδειξη

Οι δομές συντονισμού μπορούν να συγκριθούν με βάση τα παρακάτω κριτήρια, ξεκινώντας με τα πιο σημαντικά:

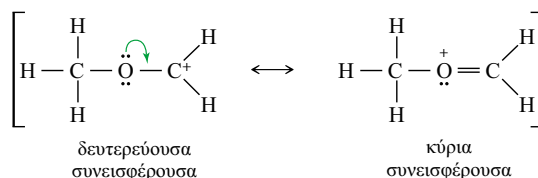
1. Όσο περισσότερες οκτάδες είναι δυνατό
2. Όσο περισσότερους διπλούς δεσμούς είναι δυνατό
3. Αρνητικά φορτία σε ηλεκτραρνητικά άτομα
4. Όσο το δυνατό μικρότερος διαχωρισμός φορτίων

ΛΥΜΕΝΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-2

Για κάθε μία από τις παρακάτω ενώσεις, γράψτε τις σημαντικές δομές συντονισμού. Δείξτε ποιες δομές είναι οι κύριες και ποιες οι δευτερεύουσες συνεισφέρουσες ή αν θα είχαν την ίδια ενέργεια.

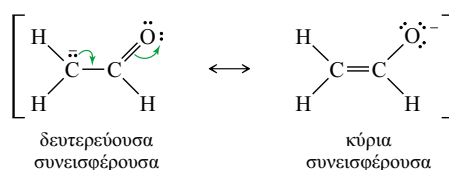


ΛΥΣΗ (a)



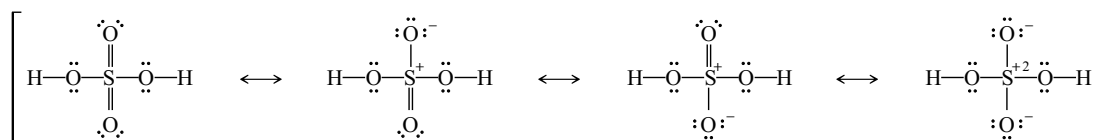
Η πρώτη (δευτερεύουσα) δομή φέρει ένα άτομο άνθρακα με μόνο έξι ηλεκτρόνια να τον περιβάλλουν. Η δεύτερη (κύρια) δομή εμφανίζει οκτάδες για όλα τα άτομα και έναν επιπλέον δεσμό.

ΛΥΣΗ (b)



Και οι δύο δομές εμφανίζουν οκτάδες τόσο στο άτομο του οξυγόνου όσο και στα δύο άτομα άνθρακα ενώ διαθέτουν τον ίδιο αριθμό δεσμών. Το αρνητικό φορτίο της πρώτης δομής βρίσκεται στον άνθρακα, ενώ της δεύτερης είναι στο οξυγόνο. Το οξυγόνο είναι ηλεκτραρνητικότερο μόριο, οπότε η δεύτερη δομή είναι η κύρια συνεισφέρουσα.

ΛΥΣΗ (c)



Η πρώτη δομή, με τους περισσότερους δεσμούς και τη μικρότερη διασπορά φορτίου, είναι δυνατή, επειδή το θείο είναι στοιχείο της τρίτης ομάδας με προσιτά *d* τροχιακά, με αποτέλεσμα το σθένος του να μπορεί να αυξηθεί. Για παράδειγμα, το SF_6 είναι μία σταθερή ένωση με 12 ηλεκτρόνια γύρω από το θείο. Ωστόσο, με βάση θεωρητικούς υπολογισμούς η τελευταία δομή, με οκτάδες σε όλα τα άτομα, μπορεί να είναι η κύρια συνεισφέρουσα δομή. Οι οργανικοί χημικοί προτιμούν να σχεδιάζουν την πρώτη ουδέτερη δομή, ενώ οι ανόργανοι χημικοί προτιμούν την τέταρτη δομή με οκτάδες σε όλα τα άτομα.

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-7

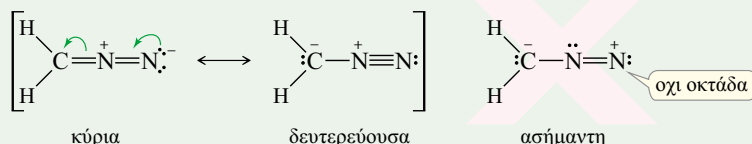
Γράψτε τις κύριες δομές συντονισμού για τα παρακάτω μόρια και ιόντα.

- (a) CO_3^{2-} (b) NO_3^- (c) NO_2^- (d) $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_2^+$
 (e) $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}_2^+$ (f) SO_4^{2-} (g) $[\text{CH}_3\text{C}(\text{OCH}_3)_2]^+$ (h) $\text{B}(\text{OH})_3$

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-8 (ΜΕΡΙΚΩΣ ΛΥΜΕΝΟ)

Για κάθε μία από τις παρακάτω ενώσεις, γράψτε τις κύριες δομές συντονισμού. Δείξτε τις δομές που αποτελούν τις κύριες και τις δευτερεύουσες συνεισφέρουσες ή έχουν την ίδια ενέργεια.

(a) H_2CCN

**ΛΥΣΗ**

Οι πρώτες δύο δομές συντονισμού έχουν συμπληρωμένες τις οκτάδες τους και έχουν τον ίδιο αριθμό δεσμών. Δείχνουν ότι το κεντρικό άτομο αζώτου έχει ένα θετικό φορτίο και ο εξωτερικός άνθρακας και το άζωτο μοιράζονται ένα αρνητικό φορτίο. Το άτομο του αζώτου είναι πιο ηλεκτραρνητικό από το άτομο του άνθρακα και έτσι αναμένουμε η δομή που φέρει το αρνητικό φορτίο στο άζωτο να είναι η κύρια συνεισφέρουσα.

Η τρίτη δομή δεν είναι αυτή που θα σχεδιάζαμε, διότι είναι πιο ασήμαντη σε σχέση με τις άλλες δύο. Φέρει άτομο αζώτου χωρίς οκτάδα και έχει λιγότερους δεσμούς σε σύγκριση με τις άλλες δύο δομές. Το άζωτο συχνά φέρει θετικό φορτίο, όταν έχει τέσσερις δεσμούς και μία οκτάδα, αλλά χωρίς αυτή δεν μπορεί να φέρει θετικό φορτίο.

- (b) $[\text{H}_2\text{CCN}]^-$ (c) $[\text{H}_2\text{COCH}_3]^+$ (d) $[\text{H}_2\text{CNO}_2]^-$ (e) $[\text{CH}_3\text{C}(\text{OH})_2]^+$

- (f) $[\text{CH}_2\text{CHNH}]^-$ (g) $\text{H}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{CH}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{H}$ (h) $\text{H}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{NH}_2$

Επίλυση προβλήματος - Υπόδειξη

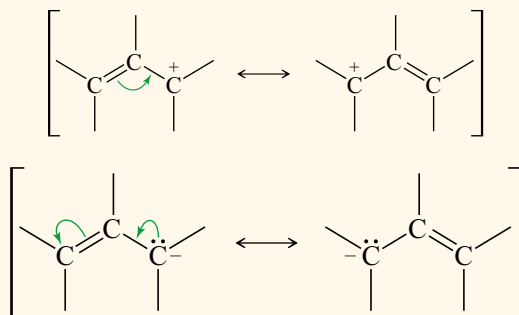
Κατά τον σχεδιασμό δομών συντονισμού ιόντων, φροντίστε ώστε το φορτίο να απεντοπίζεται σε αρκετά άτομα. Προσπαθήστε να διαχέετε τα αρνητικά φορτία σε ηλεκτραρνητικά στοιχεία όπως το οξυγόνο και το άζωτο. Προσπαθήστε να διαχέετε τα θετικά φορτία σε όσο το δυνατό περισσότερα άτομα άνθρακα, και κυρίως σε άτομα που μπορούν να φέρουν θετικό φορτίο, διατηρώντας δομή οκτάδας, όπως το οξυγόνο (με τρεις δεσμούς) ή το άζωτο με τέσσερις δεσμούς).

ΣΤΡΑΤΗΓΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ: Σχεδιασμός και Εκτίμηση Δομών Συντονισμού

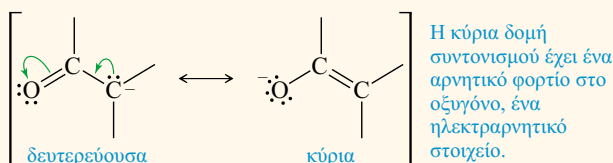
Συνήθως σχεδιάζουμε δομές συντονισμού για έναν από τους κάτωθι λόγους:

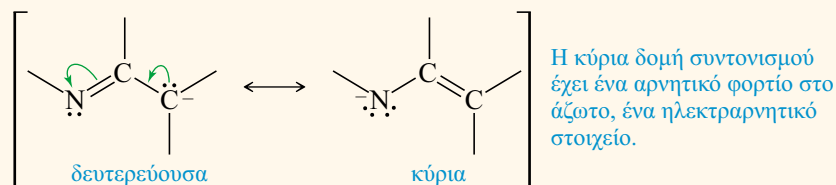
1. Για να δείξουμε πώς ο απεντοπισμός σταθεροποιεί ένα ενεργό είδος, όπως ένα κατιόν ή ένα ανιόν, με την εξάπλωση του φορτίου πάνω από δύο ή περισσότερα άτομα σε μία δομή.
2. Για να εξηγήσουμε τα χαρακτηριστικά μιας ένωσης και γιατί αντιδρά με έναν συγκεκριμένο τρόπο.

Κατά τον σχεδιασμό δομών συντονισμού θα πρέπει να δείξετε πως ένα κατιόν ή ένα ανιόν απεντοπίζεται, θα πρέπει να ψάξετε για διπλούς δεσμούς και μη δεσμικά ζεύγη ηλεκτρονίων (μονήρη ζεύγη) δίπλα σε φορτισμένα άτομα. Ένας διπλός δεσμός δίπλα σε ένα φορτισμένο άτομο μπορεί να απεντοπίσει το φορτίο. Κατά τον σχεδιασμό δομών συντονισμού, μπορείτε να χρησιμοποιήσετε καμπύλη βέλη για να παρακολουθείτε τα ηλεκτρόνια, καθώς τα μετακινείτε από το ένα μέρος στο άλλο. Θυμηθείτε ότι η κίνηση αυτή είναι φανταστική. Το μόριο είναι ένα μίγμα όλων των δομών συντονισμού ταυτόχρονα. Τα ηλεκτρόνια και τα φορτία δεν μετακινούνται εμπρός και πίσω, αλλά απεντοπίζονται διαμέσου της δομής.



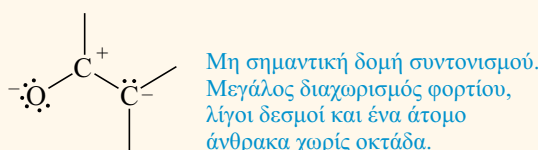
Αν ο διπλός δεσμός επιτρέπει σε ένα ηλεκτραρνητικό στοιχείο να μοιραστεί ένα αρνητικό φορτίο, τότε η δομή συντονισμού θα είναι σχετικά σταθερή. Τα πιο συνήθη παραδείγματα είναι διπλοί δεσμοί με οξυγόνο και άζωτο.





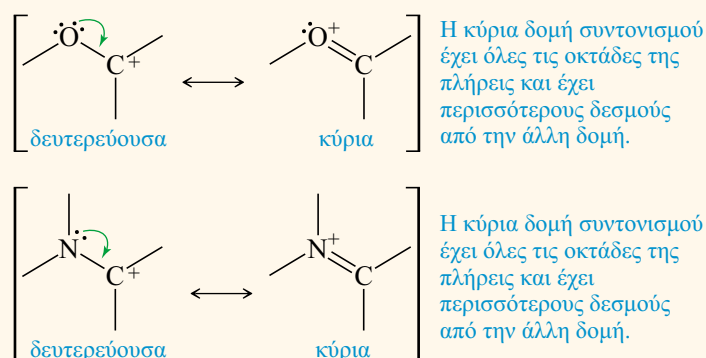
Αυτές οι δομές συντονισμού δείχνουν πως το αρνητικό φορτίο διαχέεται στο άτομο άνθρακα και στο άτομο του οξυγόνου ή του αζώτου. Όλα τα άτομα έχουν οκτάδες και στις δύο δομές, συνεπώς η πιο σημαντική δομή συντονισμού είναι αυτή με το αρνητικό φορτίο στο πιο ηλεκτραρνητικό στοιχείο, είτε στο οξυγόνο είτε στο άζωτο. Αυτές οι δομές συντονισμού δείχνουν γιατί το ανιόν μπορεί να αντιδράσει είτε με το άτομο του άνθρακα ή του οξυγόνου ή του αζώτου.

Η δομή που απεικονίζεται παρακάτω είναι μία δομή Lewis, αλλά και μία δομή συντονισμού, αλλά δεν αποτελεί σημαντική δομή συντονισμού (εκτός για τους κβαντομηχανικούς υπολογισμούς), διότι δεν βοηθάει στον απεντοπισμό του αρνητικού φορτίου και περιλαμβάνει περιττό διαχωρισμό φορτίου και ένα άτομο άνθρακα χωρίς οκτάδα. Στις περισσότερες περιπτώσεις δεν θα σχεδιάζατε αυτήν τη δομή συντονισμού.



Μη σημαντική δομή συντονισμού. Μεγάλος διαχωρισμός φορτίου, λίγοι δεσμοί και ένα άτομο άνθρακα χωρίς οκτάδα.

Ένα άτομο άνθρακα με θετικό φορτίο δεν φέρει οκτάδα. Αν συνδέεται με ένα άτομο με μη δεσμικά ηλεκτρόνια (συνήθως οξυγόνο ή άζωτο), το άτομο άνθρακα μπορεί να μοιραστεί αυτά τα μη δεσμικά ηλεκτρόνια. Αυτό του επιτρέπει να κερδίσει την οκτάδα και απεντοπίζει το θετικό φορτίο στο γειτονικό του άτομο. Τα παρακάτω παραδείγματα δείχνουν πως αυτός ο απεντοπισμός επιφέρει μεγαλύτερη σταθερότητα στο κατιόν.

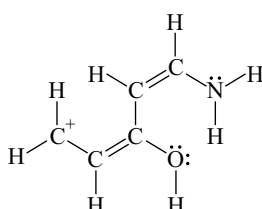


Αρχικά, αποτελεί έκπληξη ότι η κύρια δομή συντονισμού φέρει θετικό φορτίο στο οξυγόνο ή στο άζωτο, που είναι πιο ηλεκτραρνητικά από τον άνθρακα. Αλλά εδώ, η σύγκριση γίνεται μεταξύ άνθρακα με θετικό φορτίο χωρίς οκτάδα με οξυγόνο ή άζωτο με θετικό φορτίο και ολοκληρωμένη οκτάδα. Η κατάσταση αυτή είναι όμοια με τα σταθερά ιόντα H_3O^+ και NH_4^+ , τα οποία φέρουν θετικό φορτίο στο οξυγόνο ή στο άζωτο, αλλά με ολοκληρωμένη οκτάδα.

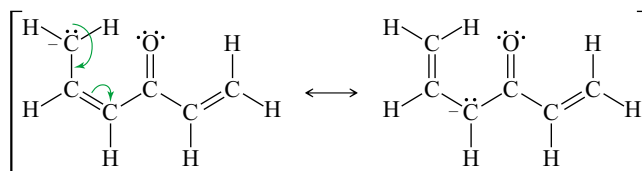
Τέλος, ας δούμε πώς μπορείτε να προσεγγίσετε προβλήματα που περιλαμβάνουν απεντοπισμό θετικών και αρνητικών φορτίων.

ΛΥΜΕΝΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-3

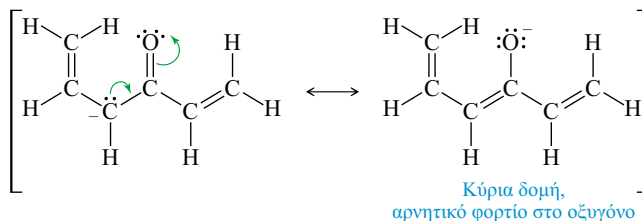
Σχεδιάστε την κύρια δομή συντονισμού του παρακάτω ανιόντος.



Θα προσπαθούσατε να τοποθετήσετε το αρνητικό φορτίο στο ηλεκτραρνητικό άτομο οξυγόνου της $\text{C}=\text{O}$ ομάδας. Αλλά πρώτα, ο άνθρακας με το αρνητικό φορτίο έχει έναν $\text{C}=\text{C}$ διπλό δεσμό δίπλα σε αυτό. Το μονήρες ζεύγος μπορεί να απεντοπιστεί στον διπλό δεσμό και να μοιραστεί το αρνητικό φορτίο με άλλον άνθρακα.



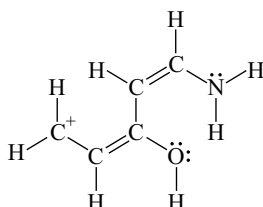
Αυτή η δεύτερη δομή έχει έναν C=O διπλό δεσμό δίπλα σε έναν άνθρακα που φέρει αρνητικό φορτίο. Μετακινώντας το ζεύγος ηλεκτρονίων σε αυτήν την κατεύθυνση απεντοπίζει το αρνητικό φορτίο στο οξυγόνο, που είναι επιθυμητό.



Σημειώστε ότι το αρνητικό φορτίο δεν μπορεί να απεντοπιστεί στον τελευταίο διπλό δεσμό στα δεξιά. Δεν υπάρχουν δομές Lewis που να θέτουν το αρνητικό φορτίο σε κάποιο από τα δύο άτομα άνθρακα.

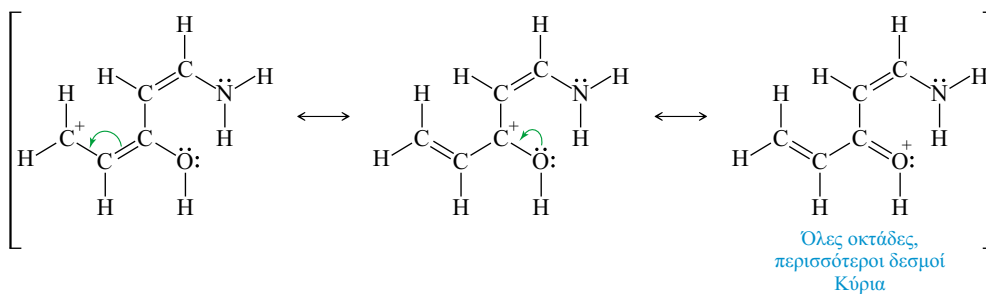
ΛΥΜΕΝΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-4

Σχεδιάστε την κύρια δομή συντονισμού του παρακάτω κατιόντος:

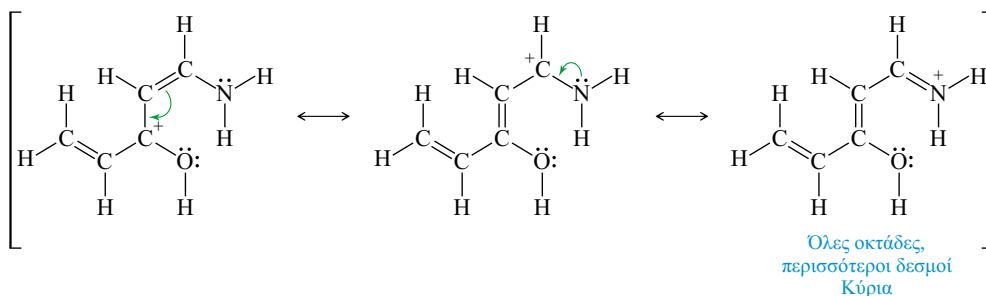


ΛΥΣΗ

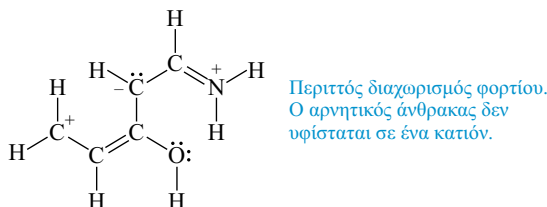
Αρχικά, θα προσπαθούσατε να τοποθετήσετε το θετικό φορτίο στο οξυγόνο (με τρεις δεσμούς) ή στο άζωτο (με τέσσερις δεσμούς), ούτως ώστε η δομή συντονισμού να φέρει οκτάδες. Αλλά αρχικά, παρατηρείστε τον διπλό δεσμό δίπλα στον άνθρακα με το θετικό φορτίο. Μετακινώντας τα ηλεκτρόνια σε αυτόν το διπλό δεσμό, το φορτίο διαμοιράζεται με άλλον άνθρακα. Αυτός ο δεύτερος άνθρακας φέρει γειτονικό οξυγόνο με μονήρες ζεύγος που μπορεί να παρέχει άνθρακα με οκτάδα, δίνοντας μία σχετικά σταθερή δομή.



Ο δεύτερος άνθρακας έχει επίσης έναν διπλό δεσμό δίπλα του. Μετακινώντας τα ηλεκτρόνια προς αυτόν το διπλό δεσμό, το φορτίο μετακινείται σε έναν τρίτο άνθρακα. Ο τρίτος άνθρακας με το θετικό φορτίο φέρει γειτονικό άζωτο με μονήρες ζεύγος που μπορεί να παρέχει άνθρακα με οκτάδα, δίνοντας μία σχετικά σταθερή δομή.



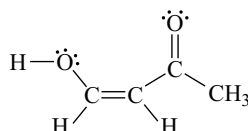
Αυτές είναι όλες οι κύριες δομές συντονισμού που θα μπορούσατε να σχεδιάσετε. Θα μπορούσατε, επίσης, να σχεδιάσετε άλλες δομές Lewis, όπως η παρακάτω, αλλά δεν θα βοηθούσαν στον απεντοπισμό του φορτίου και έχουν περιττό διαχωρισμό φορτίου. Αυτές δεν είναι σημαντικές δομές συντονισμού. Αυτή η δομή επιπλέον, δείχνει ένα αρνητικό φορτίο στο άτομο του άνθρακα, που είναι μη ρεαλιστικό σε ένα κατιόν όπου επιδιώκουμε να απεντοπίσουμε ένα θετικό φορτίο. Κανονικά δεν θα έπρεπε να σχεδιάσετε αυτήν τη μορφή συντονισμού.



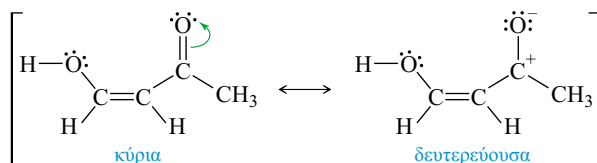
Τέλος, οι δομές συντονισμού μπορούν να σας βοηθήσουν να προβλέψετε πού αναμένετε υψηλή ή χαμηλή ηλεκτρονιακή πυκνότητα σε ένα μόριο. Για να γίνει αυτό, ψάξτε για πολική περιοχή και δείτε πώς ο συντονισμός απεντοπίζει αυτά τα μερικά φορτία στο μόριο. Άτομα που φέρουν θετικό φορτίο σε μία ή περισσότερες μορφές συντονισμού είναι πιθανόν φτωχά σε ηλεκτρόνια, ενώ αυτά που φέρουν αρνητικό φορτίο είναι πλούσια σε ηλεκτρόνια.

ΛΥΜΕΝΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-5

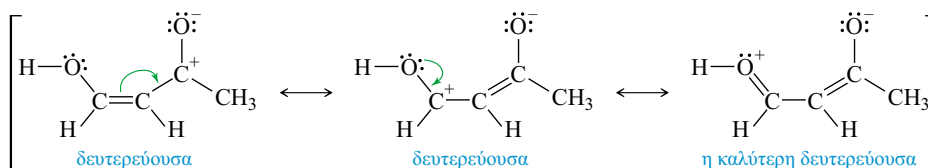
Χρησιμοποιείστε τις δομές συντονισμού για να προσδιορίσετε τις περιοχές υψηλής και χαμηλής ηλεκτρονιακής πυκνότητας στην παρακάτω ένωση.



Ο C=O δεσμός είναι πολικός, έτσι θα μπορούσατε να αρχίσετε δείχνοντας τα φορτία του. Αυτή η δομή συντονισμού δεν είναι τόσο σταθερή όσο η αρχική ουδέτερη δομή, αλλά βοηθάει στο να απεικονίσετε τα μερικά φορτία.



Μετακινώντας τους δεσμούς και τα μη δεσμικά ηλεκτρόνια δίπλα σε αυτά τα φορτία, προκύπτουν άλλες σημαντικές δομές συντονισμού. Σημειώστε ότι το οξυγόνο της OH ομάδας είναι ηλεκτρονιοδότης, ενώ το οξυγόνο της ομάδας C=O είναι ηλεκτρονιοδέκτης.



Η τελευταία δομή συντονισμού (η καλύτερη ελάχιστη) είναι η πιο σταθερή από όλες τις δομές με διαχωρισμό φορτίου. Η αρχική ουδέτερη δομή "κύρια" είναι η καλύτερη από όλες, χωρίς διαχωρισμό φορτίου, με όλες τις οκτάδες πλήρεις και τον μέγιστο αριθμό δεσμών. Είναι η πιο αντιπροσωπευτική από όλες τις δομές, σε σχέση με τις δομές συντονισμού με διαχωρισμό φορτίου. Παρ' όλα αυτά οι τελευταίες δομές υποδηλώνουν τις πλούσιες σε ηλεκτρόνια (αρνητικές) και τις φτωχές σε ηλεκτρόνια (θετικές) περιοχές του μορίου. Προβλέπουμε ότι το οξυγόνο του OH αριστερά και ο πρώτος και ο τρίτος άνθρακας είναι φτωχοί σε ηλεκτρόνια, ενώ το οξυγόνο στα δεξιά (από τον C=O διπλό δεσμό) είναι πλούσιο σε ηλεκτρόνια.

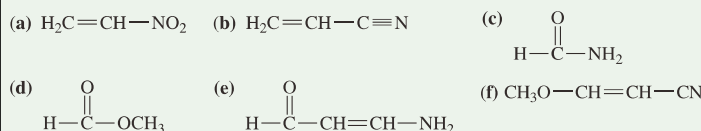
ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-9

Σχεδιάστε τις σημαντικές δομές συντονισμού των παρακάτω κατιόντων και ανιόντων:

- (a) $\text{CH}_3\text{O}-\text{CH}^+-\text{CH}=\text{CH}-\text{NH}^+$
- (b) $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}=\text{CH}-\text{C}^+=\text{O}-\text{OCH}_3$
- (c) $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{C}^+=\text{NH}_2$
- (d) $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}^+-\text{C}=\text{O}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CN}$
- (e) $\text{H}_3\text{C}-\text{C}^+=\text{O}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CN}$
- (f) $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{C}^+=\text{NH}_2$

ΠΡΟΒΛΗΜΑ 1-10

Χρησιμοποιείστε τις δομές συντονισμού για να προσδιορίσετε τις περιοχές υψηλής και χαμηλής ηλεκτρονιακής πυκνότητας στις παρακάτω ενώσεις:

**1-10 Συντακτικοί Τύποι**

Οι οργανικοί χημικοί χρησιμοποιούν διάφορα είδη τύπων για τη γραφή οργανικών ενώσεων. Μερικοί από τους τύπους αυτούς απαιτούν τη χρήση ειδικής σημειογραφίας, η οποία χρήζει επεξήγησης. Οι **συντακτικοί τύποι** δείχνουν στην πραγματικότητα πώς συνδέονται τα άτομα μιας ένωσης μεταξύ τους. Υπάρχουν δύο είδη συντακτικών τύπων, οι πλήρεις δομές Lewis και οι συμπυκνωμένοι συντακτικοί τύποι. Επίσης, υπάρχουν αρκετοί τρόποι σχεδίασης των συμπυκνωμένων συντακτικών δεσμών. Όπως έχουμε δει, στις δομές Lewis, ένα δεσμικό ζεύγος ηλεκτρονίων συμβολίζεται με ένα ζεύγος στιγμών ή με μία παύλα (-). Τα μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων συμβολίζονται με ένα ζεύγος στιγμών.

1-10A Συμπυκνωμένοι Συντακτικοί Τύποι

Στους **συμπυκνωμένους συντακτικούς τύπους** (Πίνακας 1-2) δεν απεικονίζονται όλοι οι μεμονωμένοι δεσμοί. Σε κάθε συμπυκνωμένη δομή, κάθε κεντρικό άτομο απεικονίζεται μαζί με τα άτομα που συνδέονται με αυτό. Τα άτομα που συνδέονται με το κεντρικό άτομο γράφονται συνήθως μετά το κεντρικό (όπως στο CH_3CH_3 αντί του $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$), ακόμη και αν δεν πρόκειται για την πραγματική σειρά δέσμευσης. Σε πολλές περιπτώσεις, χρησιμοποιούνται παρενθέσεις και υποστίξεις για την περιγραφή ίδιων ομάδων. Τα μη δεσμικά ηλεκτρόνια, σπάνια απεικονίζονται σε συμπυκνωμένους συντακτικούς τύπους.

ΠΙΝΑΚΑΣ 1-2 Παραδείγματα Συμπυκνωμένων Συντακτικών Τύπων

Ένωση	Δομή Lewis	Συμπυκνωμένοι Συντακτικοί Τύποι
αιθάνιο	$\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{H}-\text{C}- & \text{C}-\text{H} \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$	CH_3CH_3
ισοβουτάνιο	$\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & \\ \text{H}-\text{C}- & \text{C}- & \text{C}-\text{H} \\ & & \\ \text{H} & \text{H}-\text{C}-\text{H} & \text{H} \\ & \\ & \text{H} \end{array}$	$(\text{CH}_3)_3\text{CH}$
n-εξάνιο	$\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\ & & & & & \\ \text{H}-\text{C}- & \text{C}- & \text{C}- & \text{C}- & \text{C}- & \text{C}-\text{H} \\ & & & & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$
διαιθυλαιθέρας	$\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} & & \text{H} & \text{H} \\ & & & & \\ \text{H}-\text{C}- & \text{C}- & \ddot{\text{O}}- & \text{C}- & \text{C}-\text{H} \\ & & & & \\ \text{H} & \text{H} & & \text{H} & \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{l} \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3 \\ \text{ή} \quad \text{CH}_3\text{CH}_2-\text{O}-\text{CH}_2\text{CH}_3 \\ \text{ή} \quad (\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{O} \end{array}$
αιθανόλη	$\begin{array}{c} \text{H} & \text{H} \\ & \\ \text{H}-\text{C}- & \text{C}-\ddot{\text{O}}-\text{H} \\ & \\ \text{H} & \text{H} \end{array}$	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$
ισοπροπυλική αλκοόλη	$\begin{array}{c} \text{H} & \ddot{\text{O}}-\text{H} & \text{H} \\ & & \\ \text{H}-\text{C}- & \text{C}- & \text{C}-\text{H} \\ & & \\ \text{H} & \text{H} & \text{H} \end{array}$	$(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$
διμεθυλαμίνη	$\begin{array}{c} \text{H} & & \text{H} \\ & & \\ \text{H}-\text{C}- & \ddot{\text{N}}- & \text{C}-\text{H} \\ & & \\ \text{H} & & \text{H} \end{array}$	$(\text{CH}_3)_2\text{NH}$

Κατά τον σχεδιασμό του συντακτικού τύπου μίας ένωσης με διπλούς ή τριπλούς δεσμούς, οι πολλαπλοί δεσμοί συνήθως γράφονται όπως και στις δομές Lewis. Στον Πίνακα 1-3 περιέχονται παραδείγματα συμπυκνωμένων συντακτικών τύπων με πολλαπλούς δεσμούς. Παρατηρήστε ότι η αλδεϋδομάδα $-\text{CHO}$ και η καρβοξυλομάδα $-\text{COOH}$ συνδέονται με τρόπο διαφορετικό από αυτόν που δείχνει ο συμπυκνωμένος τύπος. Οι συμπυκνωμένες δομές ακολουθούν τον κανόνα της οκτάδας, ακόμη και αν δεν απεικονίζονται οι δεσμοί.