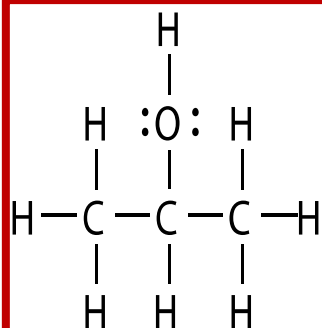
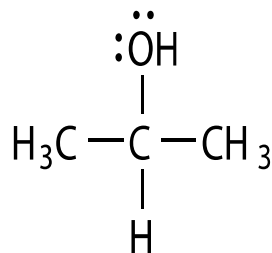


Μοριακές Αναπαραστάσεις

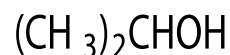
Υπάρχουν πολλοί τρόποι αναπαράστασης των μορίων



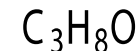
Δομή Lewis



Μερικώς συμπυκνωμένη δομή



Συμπυκνωμένη δομή

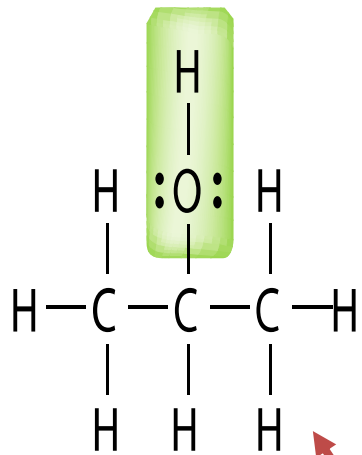


Μοριακός τύπος

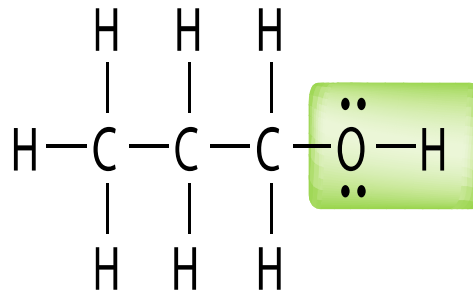
Εάν αναπαριστούσαμε ένα μεγάλο μόριο με 20 ή περισσότερα άτομα, ποια δομή θα ήταν πιο χρονοβόρα στη σχεδίαση;

Ποιες δομές μας παρέχουν τις περισσότερες πληροφορίες σχετικά με τη δομή;

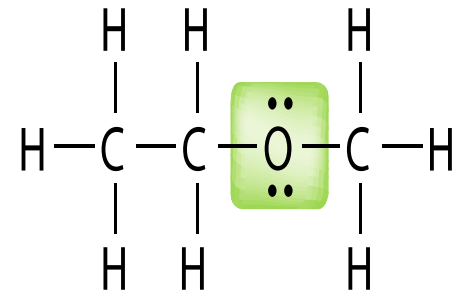
Υπάρχουν τρία ισομερή της προπανόλης (κάτω), ποιες από τις προηγούμενες δομές επαρκούν για να αναπαραστήσουν μόνο τη ισοπροπανόλη και όχι τα ισομερή της;



Ισοπροπανόλη



Προπανόλη

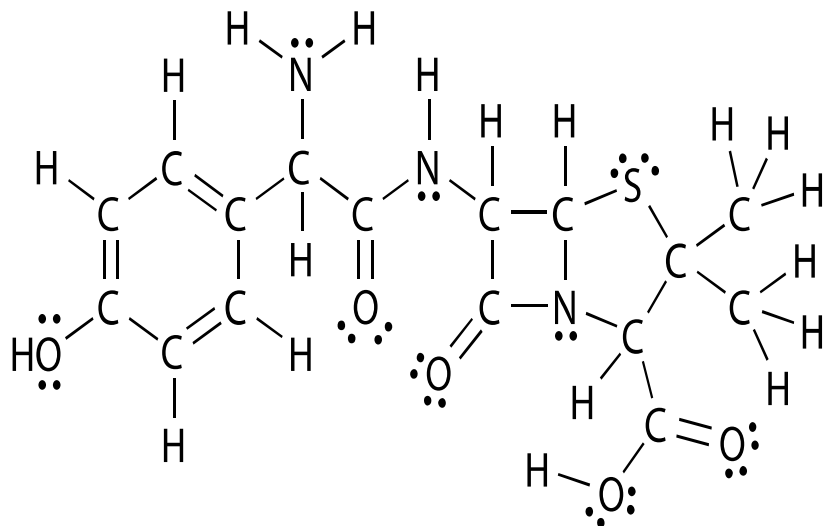


Αίθυλο μέθυλο αιθέρας

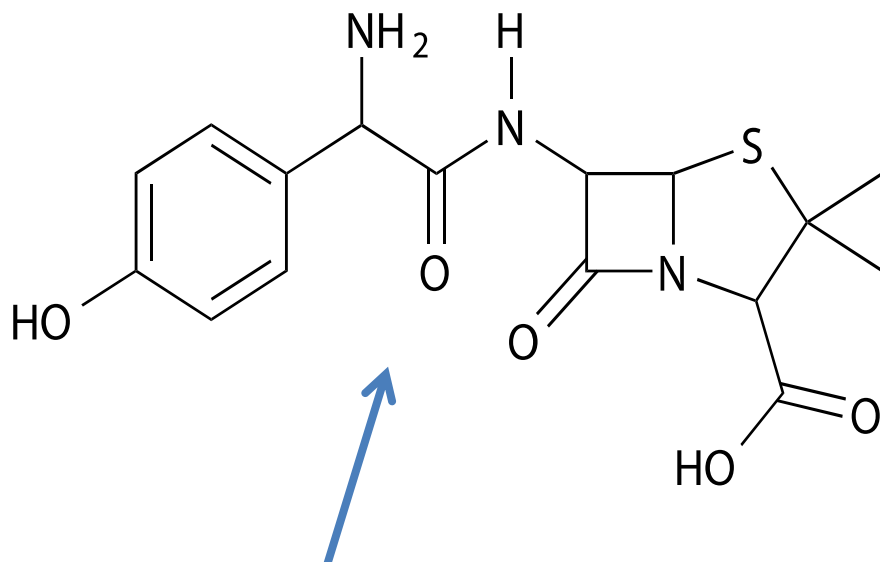
Η συμπυκνωμένη δομή: $(\text{CH}_3)_2\text{CHOH}$.

Για τη σχεδίαση μεγάλων μορίων γρήγορα, απαιτείται ένα διαφορετικό είδος αναπαράστασης.

Η δομή Lewis του μορίου της αμοξικιλίνης φαίνεται πολύπλοκη και η σχεδιάσή της θα ήταν αρκετά χρονοβόρα.



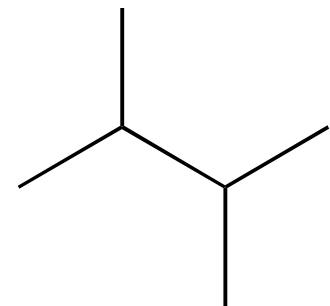
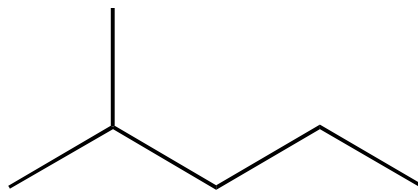
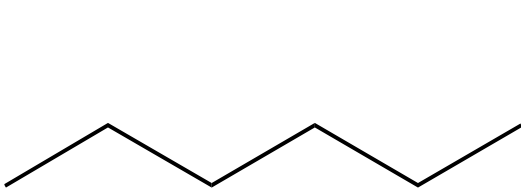
Αμοξικιλίνη



Η σκελετική δομή διαβάζεται και σχεδιάζεται ευκολότερα.

Σκελετικές Δομές

- Πολλά από τα άτομα δεν αναγράφονται.
- Αυτός ο τύπος αναπαράστασης είναι ο κύριος τρόπος απόδοσης των χημικών δομών.
- Όπως και στις δομές Lewis, οι γραμμές σχεδιάζονται μεταξύ των ατόμων για να δείξουν ομοιοπολικούς δεσμούς.
- Τα άτομα συνδέονται υπό γωνίες (ζιγκ ζαγκ) αναπαριστώντας την πραγματική γεωμετρία περίπου των γωνιών των δεσμών.
- Τα άτομα άνθρακα δεν αναγράφονται, αλλά ένα άτομο άνθρακα υποτίθεται ότι βρίσκεται σε κάθε γωνία ή άκρο της γραμμής στο ζιγκ ζαγκ.
- Οι δεσμοί μεταξύ ατόμων άνθρακα-υδρογόνου παραλείπονται.



- Οι διπλοί και οι τριπλοί δεσμοί αναπαριστώνται όπως προβλέπεται για τις γωνίες τους



- Ο τριπλός δεσμός σχεδιάζεται χωρίς ζιγκ-ζαγκ;



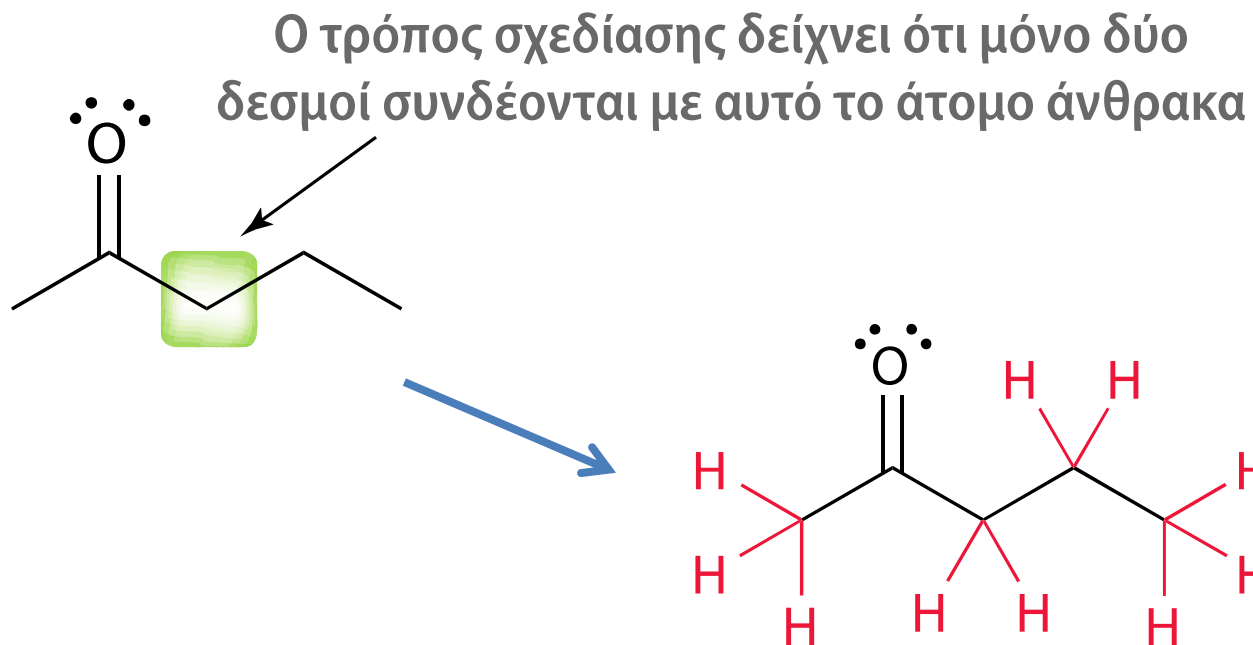
Σωστό



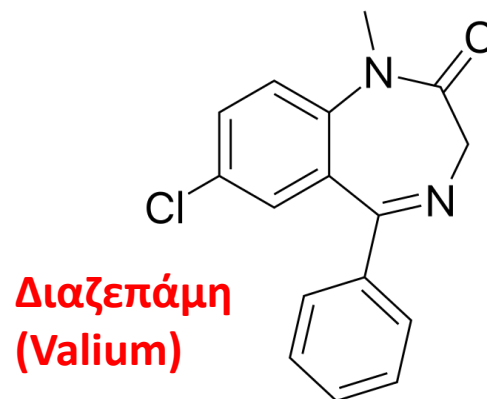
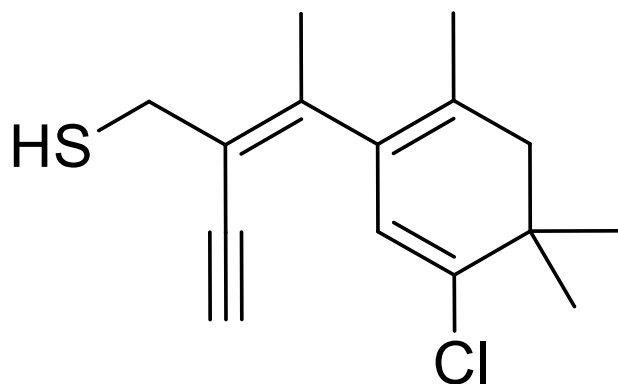
Λάθος

Η θέση και ο αριθμός των ατόμων H σε ένα μόριο ερμηνεύεται από τις σκελετικές δομές.

Τα άτομα H δεν απεικονίζονται, ωστόσο μπορούμε να υποθέσουμε ότι υπάρχουν αρκετά για να συμπληρώσουν την οκτάδα (4 δεσμοί) κάθε ατόμου άνθρακα.

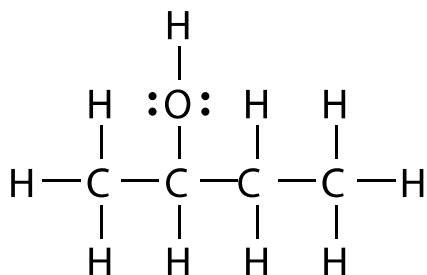


Πόσα άτομα άνθρακα και υδρογόνου υπάρχουν στα ακόλουθα μόρια;



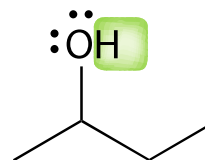
Διαζεπάμη
(Valium)

Τα ετεροάτομα (άτομα εκτός του C και του H) θα πρέπει να αναγράφονται με όλα τα άτομα υδρογόνου που συνδέονται με αυτά καθώς και τα μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων



Αυτό το H πρέπει να σχεδιαστεί:

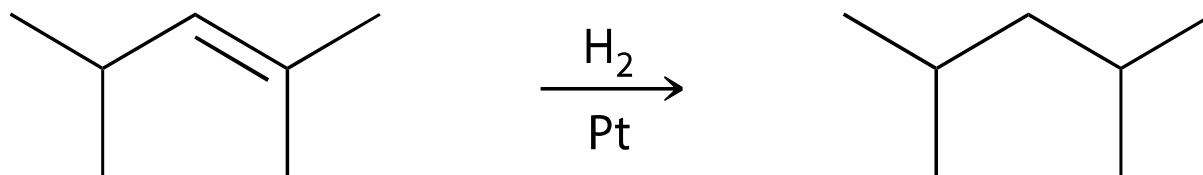
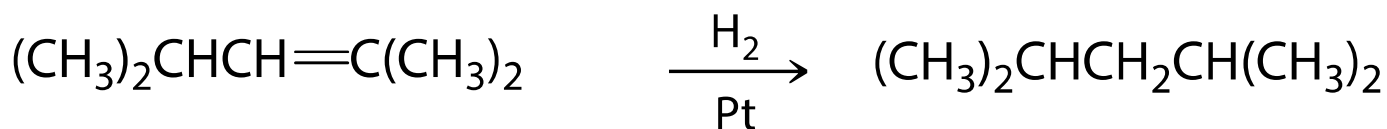
σχεδιάζεται ως εξής:



Ένα άτομο άνθρακα δεν σχεδιάζεται με περισσότερους από 4 δεσμούς!!!

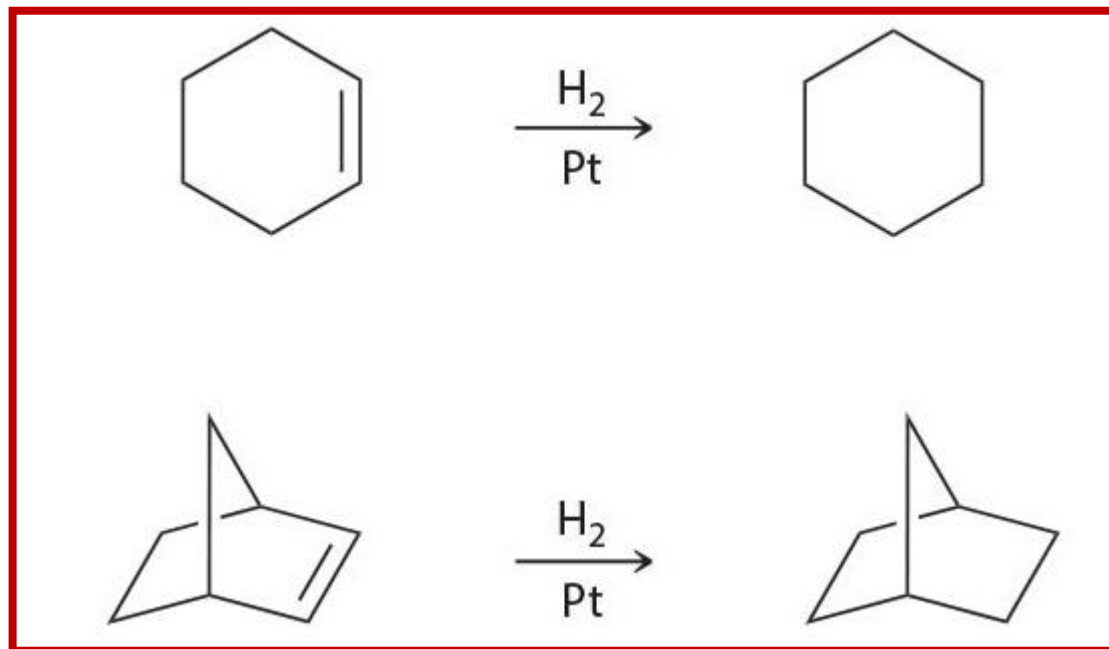
Εντοπισμός Λειτουργικών Ομάδων

- Οι σκελετικές δομές μας επιτρέπουν να εξετάσουμε γρήγορα πως μία χημική αντίδραση έχει αλλάξει ένα μόριο.
- Ας συγκρίνουμε τις παρακάτω συμπυκνωμένες δομές με τις σκελετικές δομές της ίδιας αντίδρασης



- Οι σκελετικές δομές καθιστούν πιο εμφανές ότι το H₂ αντιδρά για να μετατρέψει τον διπλό δεσμό σε απλό.

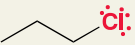
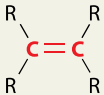
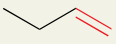
Παρόμοια χημική συμπεριφορά παρουσιάζουν (αναγωγή) οι ενώσεις:

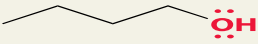
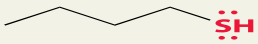
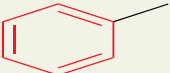


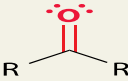
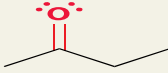
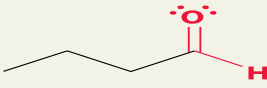
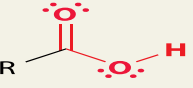
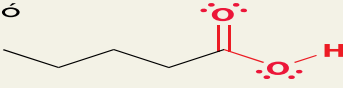
Όταν συγκεκριμένα άτομα συνδέονται μαζί σε συγκεκριμένες διατάξεις, αντιδρούν με συγκεκριμένες χημικές αντιδράσεις.

Τέτοιες διατάξεις ατόμων καλούνται λειτουργικές ομάδες.

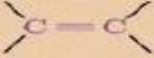
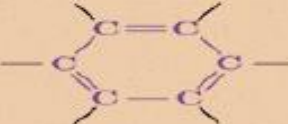
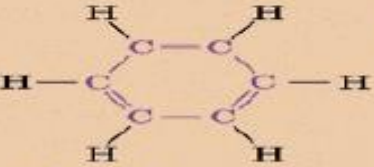
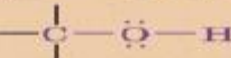
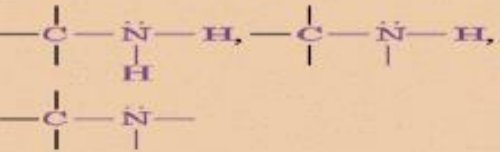
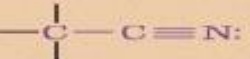
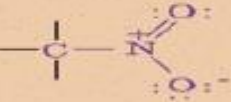
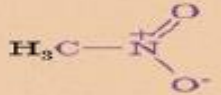
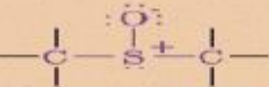
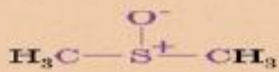
ΠΙΝΑΚΑΣ 2.1 ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΣΥΝΗΘΩΝ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΚΩΝ ΟΜΑΔΩΝ

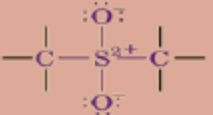
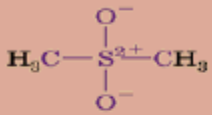
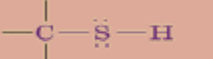
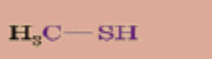
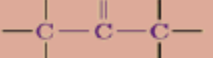
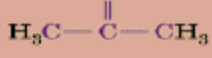
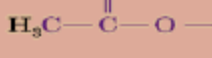
ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΚΗ ΟΜΑΔΑ*	ΟΜΟΛΟΓΗ ΣΕΙΡΑ	ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ	ΚΕΦΑΛΑΙΟ
$R-\ddot{X}:$ (X=Cl, Br ή I)	Αλκυλαλογονίδιο	 n-Προπυλοχλωρίδιο	7
	Αλκένιο	 1-Βουτένιο	8, 9
$R-C\equiv C-R$	Αλκύνιο	 1-Βουτύνιο	10

$R-\ddot{O}H$	Αλκοόλη	 1-Βουτανόλη	
$R-\ddot{O}-R$	Αιθέρας	 Διαιθυλαιθέρας	
$R-\ddot{S}H$	Θειόλη	 1-Βουτανοθειόλη	
	Αρωματική ένωση (ή αρύλιο)	 Μεθυλοβενζόλιο	

	Κετόνη	 2-Βουτανόνη	
	Αλδεΐδη	 Βουτανάλη	
	Καρβοξυλικό οξύ	 Πεντανοϊκό οξύ	

Πίνακας 3.1 Οι δομές ορισμένων κοινών λειτουργικών ομάδων.

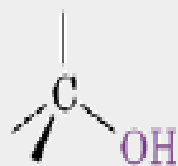
Ομόλογη σειρά	Δομή λειτουργικής ομάδας	Παράδειγμα	Κατάληξη ονομασίας
Αλκάνιο	(περιέχει μόνον απλούς δεσμούς C—C και δεσμούς C—H)	CH_3CH_3	-άνιο Λιθάνιο
Αλκένιο		$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$	-ένιο Λιθένιο (Αιθυλένιο)
Αλκύνιο	$-\text{C}\equiv\text{C}-$	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$	-ύνιο Λιθύνιο (Ακετυλένιο)
Αρένιο			καρία Βενζόλιο
Αλογονίδιο	 (X = F, Cl, Br, I)	$\text{H}_3\text{C}-\text{Cl}$	καρία Χλωρομεθάνιο
Αλκοόλη		$\text{H}_3\text{C}-\text{O}-\text{H}$	-όλη Μεθανόλη
Αιθέρας		$\text{H}_3\text{C}-\text{O}-\text{CH}_3$	αιθέρας Διμεθυλο αιθέρας
Αμίνη		$\text{H}_3\text{C}-\text{NH}_2$	-αμίνη Μεθυλαμίνη
Νιτρίλιο		$\text{H}_3\text{C}-\text{C}\equiv\text{N}$	-νιτρίλιο Λιθανονιτρίλιο (Ακετονιτρίλιο)
Νιτροένωση			καρία Νιτρομεθάνιο
Σουλφίδιο		$\text{H}_3\text{C}-\text{S}-\text{CH}_3$	σουλφίδιο Διμεθυλο σουλφίδιο
Σουλφοξείδιο			σουλφοξείδιο Διμεθυλο σουλφοξείδιο

Ομόλογη σειρά	Δομή λειτουργικής ομάδας ^a	Παράδειγμα	Κατάληξη ονομασίας
Σουλφόνη			σουλφόνη Διμεθυλο σουλφόνη
Θειόλη			-θειόλη μεθανοθειόλη
Καρβονυλο- ένωση			
Αλδεΐδη			-άλη Αιθανάλη (Ακεταλδεΐδη)
Κετόνη			-όνη Προπανόνη (Ακετόνη)
Καρβοξυλικό οξύ			-οϊκό οξύ Αιθανοϊκό οξύ (Οξικό οξύ)
Εστέρας			-οϊκό Αιθανοϊκό μεθύλιο (Οξικό μεθύλιο)
Αμίδιο			-αμίδιο Αιθαναμίδιο (Ακεταμίδιο)
Χλωρίδιο καρβοξυ- λικού οξέος			-οϊλο χλωρίδιο Αιθανοϊλο χλωρίδιο (Ακετυλο χλωρίδιο)
Ανυδρίτης καρβοξυλι- κού οξέος			-οϊκός ανυδρίτης Αιθανοϊκός ανυδρίτης (Οξικός ανυδρίτης)

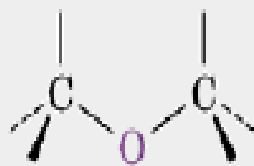
^a Οι δεσμοί στους οποίους δεν διευκρινίζονται όλα τα συνδεόμενα άτομα, υποθέτουμε ότι, στο υπόλοιπο τμήμα του μορίου, συνδέονται με άτομα άνθρακα ή υδρογόνου.



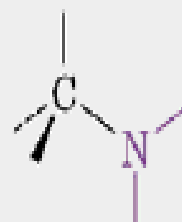
Αλκυλαλογονίδιο



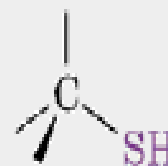
Αλκοόλη



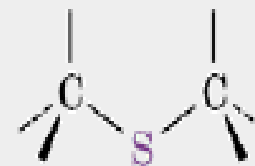
Αιθέρας



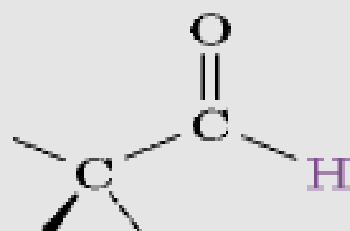
Αμίνη



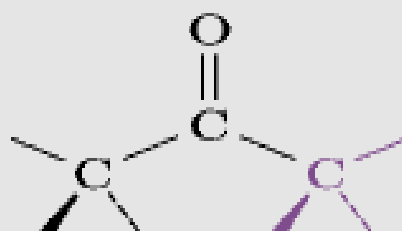
Θειόλη



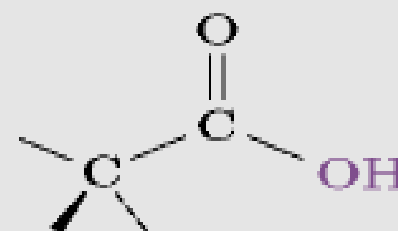
Σουλφίδιο



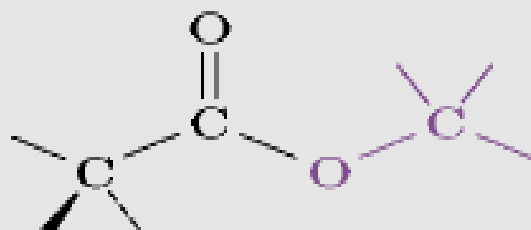
Αλδεϋδη



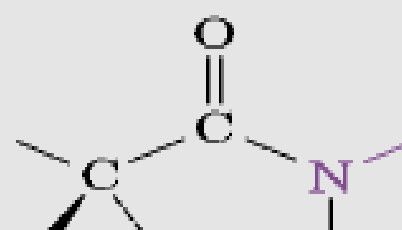
Κετόνη



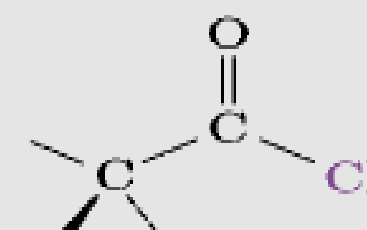
Καρβοξυλικό οξύ



Εστέρας



Αμίδιο



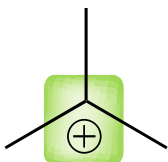
Χλωρίδιο οξέος

Άτομα Άνθρακα με Τυπικά Φορτία

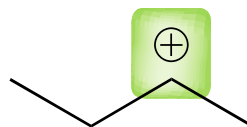
Το τυπικό φορτίο επηρεάζει τη σταθερότητα και τη δραστικότητα των μορίων.

Τα περισσότερα άτομα άνθρακα έχουν 4 ομοιοπολικούς δεσμούς και κανένα μονήρες ζεύγος ηλεκτρονίων οπότε δε φέρουν τυπικό φορτίο.

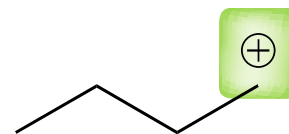
Μερικές φορές το άτομο του άνθρακα έχει ένα +1 φορτίο (καρβοκατιόν). Σε αυτές τις περιπτώσεις, το άτομο του άνθρακα έχει 3 δεσμούς.



Κανένα άτομο υδρογόνου σε αυτό το C^+

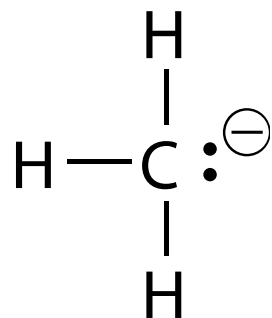


Ένα άτομο υδρογόνου σε αυτό το C^+



Δύο άτομα υδρογόνου σε αυτό το C^+

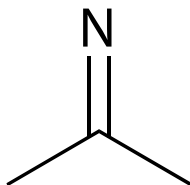
Κάποιες φορές το άτομο άνθρακα έχει φορτίο -1 (καρβανιόν).
Εάν ένα άτομο άνθρακα φέρει φορτίο σε ένα μόριο, το φορτίο
ΠΡΕΠΕΙ να φαίνεται στη σκελετική δομή.



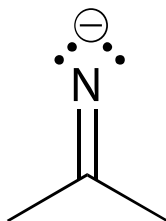
Εντοπισμός Μονήρων Ζευγών Ηλεκτρονίων

- Μερικές φορές τα μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων παραλείπονται από τις σκελετικές δομές.

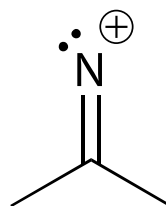
- Για παράδειγμα...



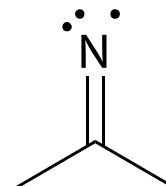
- Θα μπορούσε να είναι...



ή

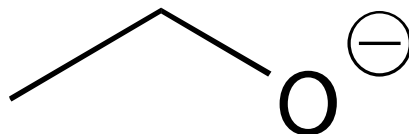


ή



Θα πρέπει ΠΑΝΤΑ να αναγράφονται τα τυπικά φορτία σε μία σκελετική δομή για να μην υπάρχει σύγχυση, οπότε μπορούν να παραλείπονται τα μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων.

Πόσα μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων υπάρχουν στο παρακάτω άτομο οξυγόνου;

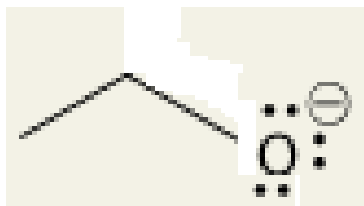


Το οξυγόνο θα πρέπει να διαθέτει 6 ηλεκτρόνια σθένους, επειδή ανήκει στην ομάδα VIA του Περιοδικού Πίνακα.

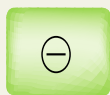
Φέρει φορτίο -1, επομένως στην πραγματικότητα πρέπει να έχει ένα επιπλέον ηλεκτρόνιο ($6+1=7$)

Το 1 ηλεκτρόνιο έχει παραχωρηθεί στο οξυγόνο από το δεσμό του με άλλο άτομο.

Πρέπει να έχει 3 μονήρη ζεύγη ηλεκτρονίων:



Μπορεί να προσδιορισθεί ο αριθμός των μονήρων ζευγών ηλεκτρονίων ενός ατόμου Ο συσχετίζοντας τον αριθμό δεσμών με το τυπικό του φορτίο



1 δεσμός + 3 μονήρη ζεύγη

Παραδείγματα:

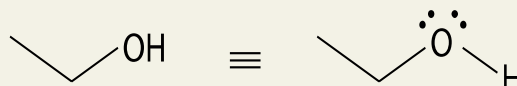


Χωρίς
φορτίο



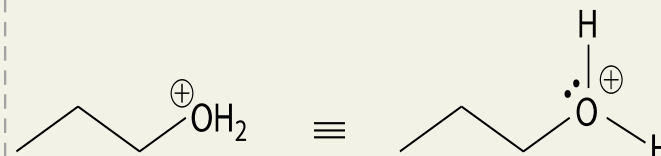
2 δεσμοί + 2 μονήρη ζεύγη

Παραδείγματα:



3 δεσμοί + 1 μονήρες ζεύγος

Παραδείγματα:

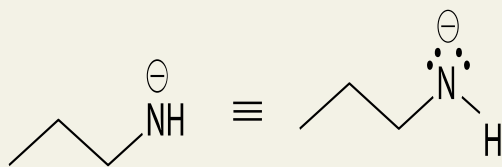


Ο αριθμός των μονήρων ζευγών ηλεκτρονίων ενός ατόμου N μπορεί να υπολογιστεί κατά τον ίδιο τρόπο συσχετίζοντας τον αριθμό δεσμών με το τυπικό του φορτίο.



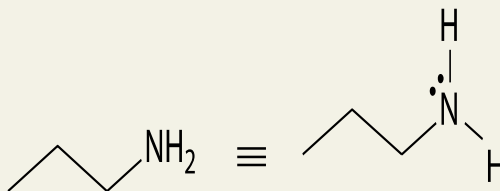
2 δεσμοί + 2 μονήρη ζεύγη

Παραδείγματα:



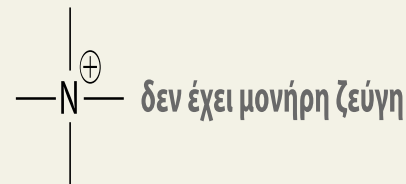
3 δεσμοί + 1 μονήρες ζεύγος

Παραδείγματα:



4 δεσμοί + 0 μονήρη ζεύγη

Παραδείγματα:

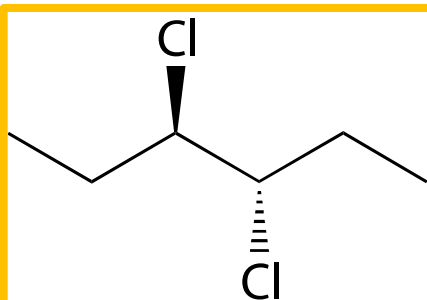


Τρισδιάστατες Σκελετικές Δομές

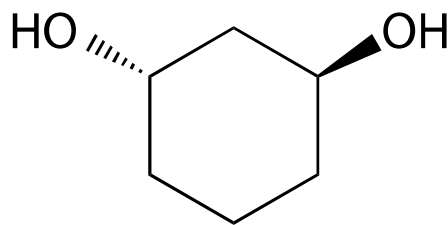
Στη συντριπτική πλειονότητά τους τα μόρια είναι τρισδιάστατα, αλλά είναι δύσκολο να αναπαρασταθεί ένα τρισδιάστατο μόριο σε ένα δισδιάστατο κομμάτι χαρτί ή στον πίνακα.

Θα χρησιμοποιήσουμε **διακεκομμένες** και **πλήρεις σφηνοειδείς γραμμές** για να απεικονίσουμε ομάδες που κατευθύνονται **πίσω** απ' το χαρτί ή **μπροστά** απ' το χαρτί.

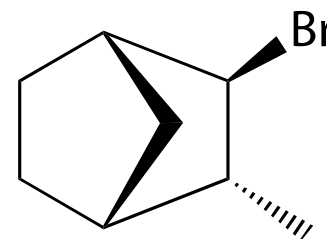
Οι λεπτές γραμμές είναι **συνεπίπεδες** με το χαρτί ή τον πίνακα.



Άκυκλη
(κανένας δακτύλιος)

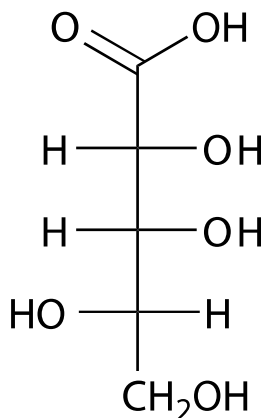


Κυκλική
(ένας δακτύλιος)



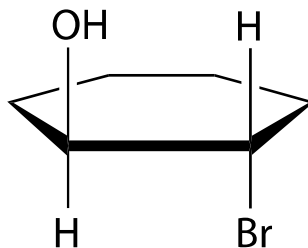
Δικυκλική
(δύο δακτύλιοι)

Άλλοι τρόποι παρουσίασης μίας τρισδιάστατης δομής.



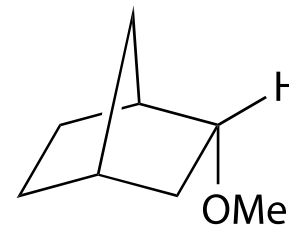
Προβολή Fischer

(Μόνο για άκυκλες ενώσεις)



Προβολή Haworth

(Μόνο για κυκλικές ενώσεις)



(Μόνο για δικυκλικές ενώσεις)